

T H E S E

PRESENTEE

A L'UNIVERSITE DE NANCY 1

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ES SCIENCES PHYSIQUES

par

DANG DINH CUNG

CONTRIBUTION PAR SIMULATIONS NUMERIQUES
A LA THEORIE DES EFFETS D'IRRADIATION
DANS LES SOLIDES CRISTALLINS

Soutenue le 16 mai 1975, devant la Commission d'Examen

MM. M. GERL

Président

C. JANOT

D. PAULMIER

Examineurs

Y. ADDA

I. TORRENS

T H E S E

PRESENTEE

A L'UNIVERSITE DE NANCY 1

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ES SCIENCES PHYSIQUES

par

DANG DINH CUNG

CONTRIBUTION PAR SIMULATIONS NUMERIQUES
A LA THEORIE DES EFFETS D'IRRADIATION
DANS LES SOLIDES CRISTALLINS

Soutenue le 16 mai 1975, devant la Commission d'Examen

MM.	M. GERL	Président
	C. JANOT	
	D. PAULMIER	Examineurs
	Y. ADDA	
	I. TORRENS	

"Vous pouvez suivre le cheminement de la moindre molécule ou entrer dans l'intimité de la matière, mais, si vous n'avez jamais connu l'amour, vous ne savez encore rien, car les calculs les plus savants ne remplacent pas un élan du coeur".

ANONYME

XIN KINH DÂNG CHA ME
A MES PARENTS



REMERCIEMENTS

Nous souhaitons exprimer notre gratitude envers

- Monsieur le Professeur GERL qui nous a fait l'honneur de patronner notre thèse, de suivre le bon déroulement de celle-ci et de présider ensuite le jury,

- Monsieur le Professeur JANOT et Monsieur le Professeur PAULMIER qui se sont intéressés à notre travail et qui nous font l'honneur de participer au jury,

- Le Docteur ADDA qui nous a accueilli dans son laboratoire et qui n'a ménagé ni son temps, ni son énergie à nous conseiller et à canaliser notre fougue juvénile dans un travail cohérent,

- Le Docteur TORRENS qui nous a proposé le sujet de thèse et qui nous a guidé au début de notre carrière,

- Tous nos camarades de la Section de Recherches de Métallurgie Physique nous ont accordé leur aide et leur amitié au sein de leur communauté, notamment Madame BUREAU qui a assuré la dactylographie de toutes nos publications,

- Et tous les autres, parents, amis et connaissances, qui nous ont exprimé leur sympathie et leurs encouragements.

Cette thèse a été financée par le Commissariat à l'Energie Atomique. Elle est rédigée à la gloire de tout le personnel hors statut de cet organisme.



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41555415_0019

TABLE DES MATIERES

Chapitre I - INTRODUCTION

I - POURQUOI CETTE THESE ?

- 1.1 - Pourquoi les effets d'irradiation ?
- 1.2 - Pourquoi les solides cristallins ?
- 1.3 - Pourquoi par simulations numériques ?

II - DELIMITATION DU SUJET

III - PLAN DE LA THESE

Chapitre II - ASPECTS PHYSIQUES DU PROBLEME

I - PARCOURS D'UNE PARTICULE DANS LE SOLIDE

- 1.1 - Paramètres caractérisant le parcours d'une particule
- 1.2 - Pouvoir d'arrêt du solide
 - 1.2.1 - Pouvoir d'arrêt nucléaire
 - 1.2.2 - Pouvoir d'arrêt électronique
- 1.3 - Distribution statistique du parcours des particules

II - CREATION DES DEFAUTS

- 2.1 - Détermination du nombre d'atomes déplacés
- 2.2 - Répartition spatiale des défauts
 - 2.2.1 - Répartition spatiale des déplacements atomiques
 - 2.2.2 - Répartition spatiale de chaque type de défauts
 - 2.2.3 - Stabilité des défauts créés

III - INFLUENCE DE LA STRUCTURE CRISTALLINE DU SOLIDE

- 3.1 - Généralités
- 3.2 - Canalisation et focalisation
 - 3.2.1 - La canalisation
 - 3.2.2 - La focalisation
 - 3.2.3 - Facteur de focalisation
- 3.3 - Influence sur les effets d'irradiation

IV - INFLUENCE DE LA PARTICULE INCIDENTE

4.1 - Irradiation aux particules légères

4.1.1 - Interaction d'un neutron rapide avec la matière

4.1.2 - Cascades de défauts créés par neutrons rapides

4.2 - Irradiation aux particules lourdes

Chapitre III - ASPECTS METHODOLOGIQUES DU PROBLEME

I - LA SIMULATION NUMERIQUE

1.1 - Définition de la simulation numérique

1.2 - Intérêts de la simulation numérique

1.3 - Apports de l'ordinateur

II - L'ANALYSE FACTORIELLE

2.1 - Principes de l'analyse factorielle

2.2 - Mise en oeuvre de l'analyse factorielle

2.2.1 - Rappel de quelques définitions mathématiques

2.2.2 - Manipulation des données

III - LES MOYENS D'INVESTIGATION

3.1 - Les programmes de simulation

3.1.1 - Programme de simulation par collisions binaires

3.1.2 - Programme de simulation par interactions multiples

3.1.3 - Programme de relaxation des atomes

3.2 - Les programmes d'analyse des données

3.2.1 - Programme de visualisation des cascades

3.2.2 - Programme d'analyse factorielle

Chapitre IV - SIMULATIONS NUMERIQUES AVEC LE MODELE D'INTERACTIONS MULTIPLES

I - PRINCIPE DU MODELE D'INTERACTIONS MULTIPLES

1.1 - Résolution du problème à plusieurs corps en mécanique newtonienne

1.2 - Calcul des énergies de défauts

1.2.1 - Méthode de résolution numérique

1.2.2 - Modèle du cristal

1.3 - Description des parcours des atomes énergiques

1.3.1 - Méthode de résolution numérique

1.3.2 - Modèle du cristal

1.3.3 - Modèle de frottements électroniques et de vibration thermique

1.4 - Essais préliminaires des modèles

1.4.1 - Comparaison avec les modèles antérieurs

1.4.2 - Précision du calcul

1.4.3 - Influence du modèle de potentiel interatomique

1.4.4 - Influence de la vibration thermique

II - PARCOURS DES ATOMES

2.1 - Parcours linéaires et distance parcourue

2.1.1 - Le problème du choix de l'énergie de coupure du projectile pour le modèle de collisions binaires

2.1.2 - Réalisation de la simulation d'un parcours d'atomes du solide

2.1.3 - Analyse des résultats des simulations

2.2 - La focalisation et la canalisation

2.2.1 - Mise en évidence de la canalisation

2.2.2 - Mise en évidence de la focalisation

2.2.3 - Calcul du facteur de focalisation

III - ECHANGES D'ENERGIE EN FOCALISATION

3.1 - Cas de la focalisation idéale en réseau statique

3.1.1 - Cas général de la collision simultanée

3.1.2 - Application aux focalisations

3.2 - Cas de la focalisation imparfaite ou en réseau avec vibrations thermiques

3.2.1 - Cas général

3.2.2 - Application à la focalisation dans la direction $\langle 110 \rangle$ du système cubique à faces centrées

IV - CREATION DES DEFANTS

4.1 - Evolution de l'énergie cinétique totale

4.2 - Séquences de remplacements

4.3 - Choix de l'énergie seuil de déplacements pour le modèle de collisions binaires

Chapitre V - SIMULATIONS NUMERIQUES AVEC LE MODELE DE COLLISIONS BINAIRES

I - INFLUENCE DES DONNEES DU MODELE

1.1 - Analyse de la population de référence

1.1.1 - Choix de la population de référence

1.1.2 - Regroupement des paramètres

1.1.3 - Stabilité de la population de référence

1.2 - Influence des hypothèses du modèle

1.2.1 - Influence du modèle de potentiel

1.2.2 - Influence du modèle de frottements électroniques

1.2.3 - Influence de l'énergie seuil de déplacements

1.3 - Influence des données physiques du problème

1.3.1 - Influence de la nature du solide

1.3.2 - Influence de la température

- 1.3.3 - Influence de l'orientation de l'impulsion initiale du premier atome frappé

II - PARCOURS DES ATOMES DANS LE SOLIDE

2.1 - Parcours des atomes du solide

- 2.1.1 - Distribution statistique des parcours atomiques
- 2.1.2 - Pouvoir d'arrêt du solide

2.2 - Parcours des atomes dans un canal

- 2.2.1 - Mise en évidence de la canalisation
- 2.2.2 - Pouvoir d'arrêt d'un canal
- 2.2.3 - Distribution statistique des parcours atomiques dans un canal

III - CREATION DES DEFAUTS

3.1 - Proposition d'un modèle général de création des défauts

- 3.1.1 - Déplacements atomiques, recombinaison immédiate des paires de FRENKEL et défauts stables créés
- 3.1.2 - Modèle macroscopique de recombinaison des paires de FRENKEL créées par irradiation
- 3.1.3 - Modèle microscopique de recombinaison immédiate des paires de FRENKEL créées par irradiation
- 3.1.4 - Vérification du modèle de création des défauts créés

3.2 - Répartition spatiale des défauts

Chapitre VI - CONCLUSIONS

I - CONCLUSION SUR LES RESULTATS OBTENUS

1.1 - Influence du réseau cristallin

- 1.1.1 - Influence de la focalisation et de la canalisation
- 1.1.2 - Influence de l'ensemble du réseau cristallin

1.2 - Aspects théoriques des effets d'irradiation

II - CONCLUSION SUR LA METHODOLOGIE EMPLOYEE

2.1 - Conclusion sur la simulation numérique

- 2.1.1 - Apport de la simulation numérique
- 2.1.2 - Adaptation de la simulation numérique

2.2 - Conclusion sur l'analyse factorielle

Annexe I - LES MODELES DE POTENTIEL INTERATOMIQUE

Annexe II - LES PARAMETRES CARACTERISANT UNE CASCADE

REFERENCES

Chapitre I

INTRODUCTION

Ce chapitre d'introduction se propose trois objectifs :

- justifier le choix du sujet de thèse (paragraphe I)
- définir les limites de notre travail (paragraphe II)
- donner le plan de la thèse (paragraphe III).

I - POURQUOI CETTE THESE ?

La lecture du sujet de cette thèse fait poser trois questions :

- pourquoi les effets d'irradiation ?
- pourquoi les solides cristallins ?
- pourquoi par simulations numériques ?

1.1 - Pourquoi les effets d'irradiation ?

On a constaté depuis des décennies déjà qu'un flux de particules énergiques change les propriétés physiques des solides [1]. Ces particules créent des défauts ou tout au moins des perturbations dans le solide. L'étude de la création de ces défauts permet de connaître la structure des défauts dans un solide ainsi que l'évolution de ceux-ci au cours du temps. Plus récemment, l'étude des effets d'irradiation devient intéressante pour l'industrie depuis qu'on a trouvé plus économique de fabriquer des micro-circuits par implantation d'ions que par diffusion atomique et surtout depuis que le développement des réacteurs surgénérateurs passe par la résolution du problème de gonflement des gaines de combustible, gonflement provoqué par le flux intense de neutrons rapides [2]. Nous avons voulu apporter notre contribution à la compréhension de ce phénomène qui est un effet d'irradiation qu'on n'a encore que très mal élucidé. Par extension notre étude intéresse aussi le développement des enceintes de fusion nucléaire étape suivante de la production d'énergie pour le siècle prochain, mais à moyen terme il intéresse également la fabrication industrielle des micro-circuits par implantation directe des ions d'impureté dans les semi-conducteurs, ou la mise au point de la sonde ionique de SLODZIAN.

1.2 - Pourquoi les solides cristallins ?

Les théories de l'effet d'irradiation se répartissent en deux grands groupes : celles qui ne tiennent pas compte de la structure cristalline des solides et celles qui en tiennent compte [3-17]. Les théories qui ne tiennent pas compte de la structure cristalline des solides sont vérifiées avec succès dans les solides amor-

phes, mais ne sont pas adaptées aux solides cristallins. Il est certes très intéressant d'étudier les effets d'irradiation sur un solide amorphe, mais, dans la réalité, la plupart des solides ont une structure cristalline, même si quelquefois nous avons affaire à des polycristaux à grains fins. Cette structure cristalline, par la périodicité de la répartition des atomes, entraîne des modifications importantes dans le parcours des atomes, donc dans les effets des particules irradiantes, par rapport à un état amorphe de même densité atomique. Pour des raisons de simplification des calculs, les théories qui tiennent compte de la structure cristalline du solide ne peuvent qu'être limitées aux cas bien particuliers de la canalisation et de la focalisation (nous définirons les termes "canalisation" et "focalisation" au chapitre II) ou à des situations très proches de ces deux cas limites. Il nous paraît donc nécessaire de bâtir une théorie ou un modèle général des effets d'irradiation qui tienne compte de la structure cristalline des solides tout en restant assez générale pour ne pas être limitée aux cas extrêmes de la canalisation ou de la focalisation.

1.3 - Pourquoi par simulations numériques ?

Une expérience d'irradiation peut durer quelques minutes dans le cas d'une irradiation avec un flux d'ions très intense, mais, souvent, elle dure plusieurs heures ou même plusieurs mois ou plusieurs années. L'exploitation des résultats est délicate car l'irradiation peut provoquer la création d'isotopes instables qui rendent les échantillons radioactifs. L'interprétation des résultats est délicate parce qu'on n'a pas encore pu expliquer valablement à l'échelle atomique le processus de changement des propriétés physiques des solides soumis à une irradiation. C'est pourquoi, dès le début des études systématiques de l'effet d'irradiation dans les solides, de nombreuses théories ont été proposées [3-18].

Intuitivement, un modèle général de l'effet d'irradiation qui tient compte de la structure cristalline des solides ne peut être que très compliqué ; car il faut faire intervenir la position exacte de chaque atome du solide. Si, en plus, on tient compte de la vibration thermique, le problème est inextricable. Aussi est-il naturel d'essayer de construire un modèle de simulation numérique qu'on peut implanter dans un ordinateur. Effectivement, dès la deuxième génération des ordinateurs, plusieurs modèles de simulation numérique ont été mis au point [19-48]. Cependant, les possibilités des ordinateurs de la deuxième génération et celles des ordinateurs du début de la troisième génération ne permettent pas de simuler des irradiations qui peuvent communiquer à au moins un atome du solide une énergie cinétique supérieure à une vingtaine de kilo-électron-volts. Depuis une demi-douzaine d'années, il est possible de faire de telles simulations [20-23, 32-41, 43-46].

II - DELIMITATION DU SUJET.

Le but de cette thèse est d'examiner les possibilités de la simulation numérique dans l'explication et la prévision des effets d'irradiation dans un solide cristallin. La simulation numérique est une méthode utilisée fréquemment en sciences humaines et en sciences naturelles ; une autre méthode très couramment pratiquée dans ces sciences est l'analyse factorielle. Appliquée aux études de simulation, nous verrons que l'analyse factorielle permet de simplifier un problème complexe et d'orienter les recherches théoriques dans les directions les plus intéres-

santes.

Quand une particule énergétique pénètre dans un solide, elle entre en collision avec un ou plusieurs atomes du solide, appelés premiers atomes frappés (ou P.A.F.) avant d'être arrêtée ou avant de quitter le solide (figure I-1). Chaque premier atome frappé crée une succession de collisions avec d'autres atomes du solide. Il se produit ainsi une cascade de collisions qui est à l'origine des changements de propriétés physiques et mécaniques du solide surtout en ce qui concerne les métaux.

Le processus de dommage d'irradiation est résumé sur la figure I-2. Un flux de particules incidentes provoque un spectre de premiers atomes frappés. Chaque premier atome frappé crée une cascade de collisions qui produit des défauts, essentiellement des lacunes et des interstitiels. Les défauts interagissent entre eux par recuit ou migrent vers les puits de défauts tels que les dislocations, les joints de grains, les cavités, ...

En principe, pour simuler un effet d'irradiation, il faudrait (figure I-3) simuler successivement (a) la création du spectre de premiers atomes frappés, (b) la création de la cascade, (c) les interactions entre les défauts dans le solide et réitérer l'opération un grand nombre de fois pour obtenir un solide endommagé par irradiation.

D'après ce que nous avons vu, nous pouvons décomposer le problème en trois :

- (a) création du spectre de premiers atomes frappés,
- (b) création de la cascade,
- (c) recuit de la cascade.

Cependant, (a) il est inutile de simuler numériquement la création du spectre de premiers atomes frappés parce que les calculs de probabilités à partir des tableaux de sections efficaces permettent de résoudre le problème à moindre coût, (b) le recuit de la cascade est un problème très complexe. Un programme de simulation numérique a été mis au point par Madame LANORE [49]. Nous avons donc concentré en priorité nos efforts sur la création de la cascade.

Par contre la création de la cascade peut être étudiée théoriquement. Des travaux de simulations numériques ont déjà été effectués par plusieurs auteurs [20-21, 23-31, 35, 30, 41]. En particulier, nous bénéficions des travaux de ROBINSON et TORRENS (I.M. TORRENS communication privée) notamment du programme MARLOWE de simulation numérique par collisions binaires.

III - PLAN DE LA THESE.

Notre thèse s'ordonnera de la façon suivante :

Nous passons en revue les modèles théoriques que nous devons introduire dans nos modèles de simulations numériques ainsi que les questions d'ordre physique que nous nous proposons d'éclaircir (Chapitre II). Nous exposons l'intérêt et la mise en oeuvre de notre méthodologie basée sur l'utilisation de l'ordinateur dans la résolution de notre problème (Chapitre III). Cette méthodologie utilise deux outils : la simulation numérique et l'analyse factorielle. Les résultats de nos simulations numériques sont discutés dans deux chapitres qui concernent un modèle adapté aux énergies inférieures à une centaine d'électron-volts et qui fait appel à des interactions multiples (Chapitre IV) et un modèle adapté aux énergies supérieures à une centaine d'électron-volts et qui peut, pour accélérer les calculs, utili-

ser l'approximation des collisions binaires (Chapitre V). Dans notre conclusion (Chapitre VI), nous discuterons de la contribution de nos résultats dans l'élaboration d'une théorie des effets d'irradiation dans le solide cristallin et de l'adaptation des méthodes d'investigations des sciences humaines aux sciences physiques.

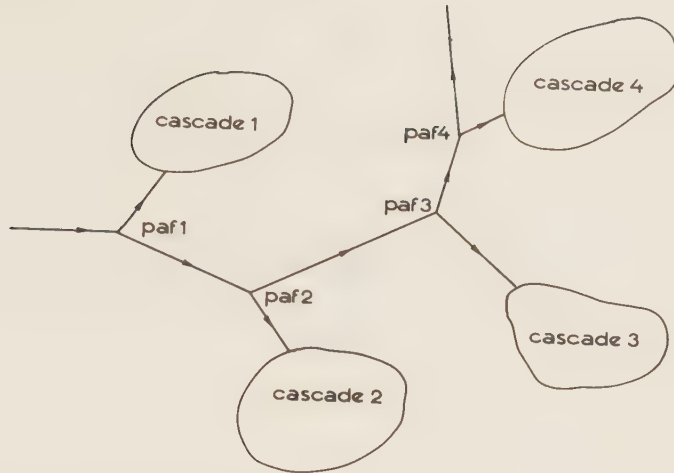


Figure I-1

Création des cascades de défauts dans un solide

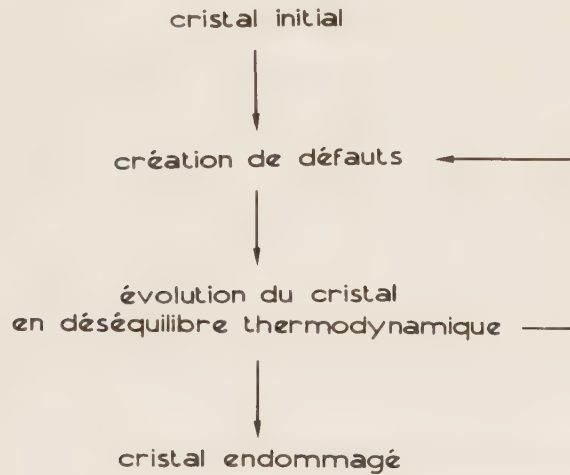


Figure I-2

Processus de création des effets d'irradiation dans un solide

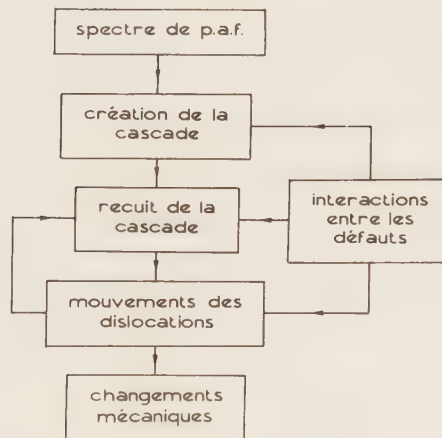


Figure I-3

Agencement théorique des programmes de simulations numériques des effets d'irradiation dans un solide

Chapitre II

ASPECTS PHYSIQUES DU PROBLEME

Dans ce chapitre, nous passerons en revue les modèles théoriques qui sont proposés pour expliquer les effets d'irradiation dans un solide.

Un effet d'irradiation est caractérisé par le parcours de la particule incidente dans le solide (paragraphe I) et par la création des défauts provoquée par cette particule (paragraphe II). Ces deux caractéristiques sont particulièrement influencées par la nature du solide, notamment par sa structure cristalline (paragraphe III), et par la nature de la particule incidente (paragraphe IV).

Depuis la publication de l'ouvrage de TORRENS [50] sur les potentiels interatomiques, nous pensons qu'il nous suffit de donner en annexe (annexe I) la liste des modèles de potentiel dont nous nous sommes servi.

Dans notre travail, nous nous sommes intéressé à :

- la détermination du pouvoir d'arrêt total du solide,
- la distribution statistique des parcours des particules,
- l'influence de la structure cristalline du solide sur la création des défauts,
- la répartition spatiale des défauts créés.

Nous sommes amené à étudier l'influence sur les résultats :

- des modèles de potentiel,
- des modèles de frottement électronique,
- des énergies seuils de déplacements.

I - PARCOURS D'UNE PARTICULE DANS LE SOLIDE.

Le parcours d'une particule dans un solide dépend du pouvoir d'arrêt de ce solide. C'est ce pouvoir d'arrêt qui détermine les valeurs des paramètres caractérisant son parcours et la distribution statistique de ces valeurs.

1.1 - Paramètres caractérisant le parcours d'une particule.

Expérimentalement, le paramètre le plus significatif du parcours d'une particule est la longueur de son parcours depuis sa position initiale jusqu'à sa position finale. Cette longueur est appelée le parcours linéaire et est reliée au pouvoir d'arrêt du solide par la relation

$$R_1 = \int_0^{E_0} \frac{dE}{(dE/dx)} \quad (\text{II.1})$$

E_0 = énergie initiale de la particule incidente

(dE/dx) = pouvoir d'arrêt de la particule par le solide.

Cependant, les collisions successives avec diverses particules du solide entraînent des déviations dans la trajectoire de la particule incidente. On est ainsi amené à définir quatre différentes grandeurs (figure II-1). Soit $\vec{r}_n$ le vecteur reliant la position de la particule incidente après la $n^{\text{ième}}$ collision à sa position après la $(n+1)^{\text{ième}}$ collision. On définit :

- Le parcours linéaire ou parcours développé, la somme $R_\ell = \sum_n |\vec{r}_n|$ qui est la longueur totale mesurée sur la courbe tracée par la particule incidente,

- La distance parcourue ou parcours vectoriel, la quantité $R_v = \left| \sum_n \vec{r}_n \right|$ qui est la distance entre la position initiale et la position finale de la particule incidente,

- La pénétration ou parcours projeté, la quantité $R_\parallel = (\vec{r}_0 \cdot \sum_n \vec{r}_n) / |\vec{r}_0|$ qui est la distance entre la position initiale et la projection de la position finale de la particule incidente sur le support de la vitesse initiale de la particule,

- Le déplacement latéral ou déviation, la quantité $R_\perp = (R_v^2 - R_\parallel^2)^{1/2}$ qui est la distance entre la position finale et la projection de la position initiale de la particule incidente sur le plan perpendiculaire à la vitesse initiale passant par la position finale de la particule.

En théorie, les paramètres caractérisant le parcours d'une particule dans un solide sont donc ces quatre grandeurs. En pratique, il faut introduire en plus les pertes d'énergie par collisions successives avec les diverses particules composant le solide, essentiellement les électrons et les noyaux. Les pertes d'énergie par collisions avec les électrons sont appelées aussi pertes par frottements électroniques et celles par collisions avec les noyaux sont souvent appelées pertes par collisions élastiques. Comme la somme de ces deux pertes d'énergie est égale à l'énergie cinétique initiale de la particule, il suffit de prendre l'une de ces pertes comme caractéristique du parcours de la particule.

1.2 - Pouvoir d'arrêt du solide.

Une particule en mouvement dans un solide agit à la fois sur le système atomique et le système électronique de ce solide. Par conséquent, le pouvoir d'arrêt (encore appelé pouvoir de ralentissement) dE/dx du solide sur la particule est la somme des deux termes nucléaire et électronique

$$dE/dx = (dE/dx)_{\text{nucl}} + (dE/dx)_{\text{elec}} \quad (\text{II.2})$$

Aux faibles énergies, le pouvoir d'arrêt nucléaire domine et provoque la plupart des dispersions angulaires du jet de projectiles. Aux grandes énergies, le pouvoir d'arrêt électronique peut dominer. Dans notre problème où l'atome primaire ou la particule incidente est un atome ou un ion assez lourd ayant une énergie inférieure à 500 keV, nous n'avons pas à tenir compte de la possibilité d'échange de charge.

Le pouvoir d'arrêt a été calculé pour la première fois par FERMI et TELLER [51].

1.2.1 - Pouvoir d'arrêt nucléaire.

Le pouvoir d'arrêt nucléaire dépend de l'effet cumulatif d'une succession de collisions élastiques entre la particule incidente et les atomes du solide.

BOHR [52] démontra que ce pouvoir d'arrêt est donné par

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{nuc1}} = N_0 \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} T d\sigma_n(E, T) \quad (\text{II.3})$$

N_0 = nombre de cibles par unité de volume,

$T_{\min}, T_{\max}$ = respectivement minimum et maximum de l'énergie qui peut être échangée dans une collision d'énergie E ,

$\sigma_n(E, T)$ = section efficace pour une collision d'énergie E provoquant un transfert d'énergie T .

Avec un potentiel de type COULOMB, il a trouvé

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{nuc1}} = \frac{\pi}{4} N_0 d^2 T_{\max} \text{Log} \left(\frac{T_{\max}}{T_{\min}} \right) \quad (\text{II.4})$$

$T_{\min}$ = échange d'énergie pour un paramètre d'impact égal au rayon de BOHR,

$T_{\max} = 4 M_1 M_2 E / (M_1 + M_2)^2$, maximum de l'énergie qui peut être échangée dans un choc frontal,

$d = Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2) / M_2 E$, distance minimale d'approche,

M_1, M_2 = respectivement masse du projectile et de la cible,

Z_1, Z_2 = respectivement charge du projectile et de la cible.

Avec un potentiel de type carré de l'inverse de la distance interatomique, NIELSEN [53] a trouvé

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{nuc1}} = 0,6 \frac{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}}{Z_1 Z_2} \times \frac{M_1 + M_2}{M_1} M_2 \quad (\text{II.5})$$

avec les distances exprimées en $\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ et des énergies en keV. On remarque que ce pouvoir d'arrêt est indépendant de l'énergie du projectile.

Avec un potentiel de type THOMAS-FERMI, LINDHARD et col. [54-56] ont donné une méthode de calcul numérique du pouvoir d'arrêt. Ce pouvoir d'arrêt est, dans la plupart des cas, inférieur à celui calculé par la formule de NIELSEN [53] et passe par un maximum quand l'énergie croît.

1.2.2 - Pouvoir d'arrêt électronique.

Le pouvoir d'arrêt pour les particules légères à grande vitesse est très bien connu depuis le début du siècle. Malheureusement, dans le cas qui nous intéresse, les particules sont des ions ou des atomes assez lourds qui ont une vitesse très inférieure à celle de l'électron de BOHR. Les problèmes sont plus complexes et les théories moins précises. En général, elles conduisent à un pouvoir d'arrêt analogue à un frottement, c'est-à-dire proportionnel à la vitesse.

LINDHARD et col. [54-56] ont étudié le pouvoir d'arrêt d'une particule chargée dans un gaz d'électron uniforme. En étendant la théorie à des atomes ayant une répartition électronique de type THOMAS-FERMI, ils ont obtenu

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{elec}} = 8 \pi e^2 a_B \xi_e N_0 \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \cdot \frac{v}{v_0} \quad (\text{II.6})$$

pour $0 < v < v_0 Z^{2/3}$

$v_0 = \alpha c$

α = constante de structure fine,

c = vitesse de la lumière,

v = vitesse du projectile,

N_0 = densité atomique du solide,

ξ_e = une constante ayant approximativement la valeur $Z_1^{3/6}$.

FIRSOV [57] et, à sa suite, plusieurs autres soviétiques [58, 59] ont développé une théorie basée sur l'hypothèse que, pendant la collision, il y a mélange des électrons des deux particules incidentes. Avec une répartition des électrons de type THOMAS-FERMI, ils ont obtenu

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{elec}} = 7,51 (3 \pi^2 h a_B/32) N_0 (Z_1 + Z_2) v \quad (\text{II.7})$$

La constante 7,51 provient de divers calculs d'intégration réalisés par FIRSOV.

En reprenant les hypothèses de FIRSOV, CHESHIRE et col. [60, 61] ont résolu le problème avec des fonctions d'onde de HARTREE-FOCK. Ils sont arrivés à des prévisions plus proches des résultats expérimentaux. Des résultats analogues sont obtenus également par BHALLA et BRADFORD [62], WINTERBON [63] et EL HOSHY et GIBBONS [64].

Jusqu'à récemment, on préfère utiliser le modèle de FIRSOV [57] parce qu'il permet, dans une collision binaire, de calculer la perte par collision électronique en fonction du paramètre d'impact

$$\Delta E_{\text{elec}} = \frac{4.3 \times 10^{-8} (Z_1 + Z_2)^{5/3}}{[1 + 0.31 (Z_1 + Z_2)^{1/3 b}]^5} v \quad (\text{II.8})$$

ΔE_{elec} en eV,

b = paramètre d'impact en Å,

v = vitesse relative en cm.sec⁻¹

Ce modèle a l'avantage d'être facilement programmable dans un modèle de simulation.

1.3 - Distribution statistique du parcours des particules.

Connaissant le pouvoir d'arrêt dE/dx d'une particule par un solide, on peut calculer le parcours linéaire R_ℓ de cette particule dans le solide par

$$R_\ell = \int_0^{E_0} \frac{dE}{dE/dx} \quad (\text{II.9})$$

E_0 = énergie cinétique initiale de la particule.

Mais cette valeur de R_ℓ trouvée doit être considérée comme une valeur moyenne. En effet, le processus de freinage provient d'une série de collisions élastiques ou non qui sont statistiquement indépendantes et chaque collision peut transférer une énergie qui peut varier entre un maximum et un minimum, ce qui entraîne une fluctuation des longueurs du parcours linéaire de la particule. On a donc une certaine distribution statistique de ces parcours linéaires.

L'idée la plus simple serait de supposer que la distribution statistique du parcours linéaire est gaussienne. Avec cette hypothèse, BOHR [52] a calculé la variance de la distribution des R_ℓ :

$$\langle \Delta R_\ell^2 \rangle = \int_0^{E_0} 4 \pi N_0 e^4 Z_1^2 \left(\frac{dE}{dx} \right)^{-3} dE \quad (\text{II.10})$$

N_0 = densité d'atomes cibles,

e = charge élémentaire,

Z_1 = numéro atomique du projectile.

Pour les collisions entre atomes, il a trouvé

$$\frac{\langle \Delta R_\ell^2 \rangle}{\langle \Delta R_\ell^2 \rangle} = \frac{4}{3} \times \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (\text{II.11})$$

Avec le potentiel de THOMAS-FERMI, LINDHARD et col. [56] ont trouvé numériquement des valeurs de $\langle \Delta R_\ell^2 \rangle / \langle \Delta R_\ell^2 \rangle$ moitié moindres que celle trouvée par la formule de BOHR [52]. En partant de la théorie de LINDHARD et col. [56], WINTERBON et col. [65, 66] ont mis au point un algorithme permettant de calculer le profil d'implantation des ions et des défauts créés par bombardement ionique.

En utilisant la méthode opératorielle, LEIBFRIED [67] et, indépendamment, KORCHOVEI et col. [68] ont démontré qu'avec des sphères dures le parcours linéaire suit la loi

$$f(R_\ell, E) = \frac{R_\ell}{\lambda^2} \exp(-R_\ell/\lambda) \quad (\text{II.12})$$

λ = libre parcours moyen de la particule dans le solide.

En appliquant la méthode de LEIBFRIED pour les libres parcours moyens proportionnels à la racine carrée de l'énergie, HOLMES [69] a trouvé que le parcours linéaire suit la loi

$$f(R_\ell) = \frac{R_\ell^2}{2 \lambda_0^3} \exp(-R_\ell/\lambda_0) \quad (\text{II.13})$$

λ_0 = libre parcours moyen de la particule à l'énergie cinétique initiale E_0 .

II - CREATION DES DEFAUTS.

Deux critères caractérisent la création des défauts :

- le nombre de défauts créés,
- la répartition spatiale de ces défauts.

Les défauts sont créés à partir d'une succession de collisions nucléaires. Mais il y a aussi des collisions électroniques et il est nécessaire de connaître quelle est la part de l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé qui est dissipée par collisions nucléaires. Les calculs théoriques de cette part d'énergie dissipée par collisions nucléaires concernent surtout les semi-conducteurs. Ainsi LINDHARD et col. [56] ont donné une méthode de calcul numérique. HAINES et WHITEHEAD [70], en partant du modèle de collision de BOHR, en ont aussi donné une méthode nu-

mérique. Les deux résultats rapportés aux unités réduites de LINDHARD et col. [56] ne sont pas très différents.

2.1 - Détermination du nombre d'atomes déplacés.

A partir de l'énergie perdue par collisions nucléaires, on peut évaluer le nombre d'atomes déplacés. Le modèle le plus connu et le plus couramment admis est celui de KINCHIN et PEASE [71].

KINCHIN et PEASE font six hypothèses :

- (a) Les atomes se comportent comme des sphères dures.
- (b) Toutes les collisions sont élastiques et il n'y a pas d'énergie dissipée par excitation électronique.
- (c) La cascade se développe par une succession de collisions binaires.
- (d) Ces collisions sont indépendantes l'une de l'autre et il n'y a aucune corrélation provoquée par la structure périodique du cristal.
- (e) Il n'y a pas d'excitation de réseau.
- (f) Un atome au repos qui reçoit une énergie inférieure à E_d , appelée énergie seuil de déplacement, n'est pas déplacé et un projectile qui n'a plus qu'une énergie inférieure à E_d ne contribue plus au processus de création des défauts.

Le modèle de KINCHIN et PEASE est résumé sur les figures II-2 et II-3. On arrive ainsi à l'évaluation de $\nu(E)$, nombre d'atomes déplacés, en fonction de l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé

$$\nu(E) = \begin{cases} E_i/2 E_d & E_i < E \\ E/2 E_d & 2 E_d < E \leq E_i \\ 1 & E_d < E \leq 2 E_d \\ 0 & E \leq E_d \end{cases} \quad (\text{II.14})$$

E_i = énergie d'ionisation.

Pour tenir compte des collisions électroniques, on remplace E par E_d appelée énergie de dommage et qui est la différence entre l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé et le total des énergies dissipées par collisions électro-

niques. En supposant que l'énergie E_d est perdue après chaque collision, SNYDER et NEUFELD [72] ont trouvé presque la même formule

$$\nu(E) = 0.56 (1 + E/E_d) \quad E > 4 E_d \quad (\text{II.15})$$

D'autres calculs ont été faits par BROWN et GOEDECKE [73], LEHMANN [74], ROBINSON [75], puis SANDERS [76] en tenant compte d'un modèle de potentiel plus réaliste. On arrive ainsi à une petite modification de la formule de KINCHIN et PEASE

$$\nu(E) = \xi(E) \frac{E}{2 E_d} \quad (\text{II.16})$$

$\xi(E)$ = facteur correctif à la formule de KINCHIN et PEASE.

2.2 - Répartition spatiale des défauts.

Le problème de la répartition spatiale des défauts est triple :

- La répartition spatiale des déplacements atomiques.
- La répartition spatiale de chaque type de défauts par rapport aux défauts d'autres types.
- La stabilité mécanique de ces défauts à l'exclusion de tout phénomène de migration thermique.

2.2.1 - Répartition spatiale des déplacements atomiques.

Les modèles de répartition spatiale des défauts s'attachent à calculer les pertes d'énergie par collisions nucléaires en fonction de la pénétration du premier atome frappé. En effet, sachant qu'à une certaine distance de pénétration le premier atome frappé cède une énergie $\mathcal{E}$ à un autre atome, cet atome va se comporter comme un premier atome frappé d'énergie E et créer lui aussi une cascade. Sachant qu'un atome d'énergie $\mathcal{E}$ peut créer une cascade de $\nu(\mathcal{E})$ atomes déplacés, on peut dire que, à une distance de pénétration donnée, le premier atome frappé perd une énergie $\mathcal{E}$ par collisions nucléaires et crée $\nu(\mathcal{E})$ déplacements.

Plus généralement, si la densité de probabilité des atomes déplacés entre $\vec{r}$ et $\vec{r} + d\vec{r}$ est $p(\vec{r}) d\vec{r}$, le nombre de défauts créés est

$$\nu(E) p(\vec{r}) d\vec{r} \quad (\text{II.17})$$

Pour un solide amorphe, LEIBFRIED [77] a trouvé que la zone endommagée a la forme d'une ellipsoïde de révolution autour du support de la vitesse initiale du premier atome frappé et dont le grand axe est confondu avec ce support. La distribution des atomes déplacés est gaussienne perpendiculairement à ce grand axe.

2.2.2 - Répartition spatiale de chaque type de défauts.

La répartition spatiale des déplacements atomiques ne permet de connaître qu'un ordre de grandeur de la taille de la zone endommagée. Il nous faut aussi connaître la position de chaque type de défauts relativement à d'autres afin de pouvoir prévoir l'évolution future de la zone endommagée en fonction des possibilités de réactions entre les défauts. Par exemple, si les interstitiels sont trop près des lacunes, il y a soit une recombinaison immédiate des paires de FRENKEL, soit au moins un rapide recuit qui fait disparaître les effets de l'irradiation.

Quand l'atome incident a une énergie cinétique élevée, sa section efficace est faible et les collisions sont espacées. Nous avons dit que les atomes qui sont entrés en collision avec lui se comportent comme des premiers atomes frappés. Il y a donc, sur la trajectoire de l'atome incident, une succession de sous-cascades. A mesure que l'énergie cinétique diminue, la section efficace de l'atome incident augmente et celui-ci entre en collision simultanément et collectivement avec plusieurs atomes du solide. Comme son énergie cinétique est faible, il ne peut provoquer que de petits déplacements. Il y a donc une zone très limitée d'où des atomes sont chassés. D'après ce raisonnement, dû à BRINKMAN [78], la zone endommagée est composée d'une succession de petites zones à forte concentration de lacunes entourées d'interstitiels. On appelle ces zones les pointes de déplacements.

2.2.3 - Stabilité des défauts créés.

Le problème de la stabilité des défauts créés est un problème assez contreversé par la question de l'existence de la pointe thermique créée par irradiation.

En faveur de la pointe thermique, on remarque qu'il faut évacuer l'énergie cinétique de l'atome incident. SEITZ et KOEHLER [79] pensent que cette énergie suffit à faire fondre la zone endommagée et qu'il se produit alors une recristallisation de cette zone. BRINKMAN [78] pense qu'il y a sublimation de la zone. En tout cas, il y a élévation de la température de la zone endommagée, ce qui permet à la majeure partie des interstitiels de réoccuper les sites de lacunes.

Par contre, il y a deux principaux arguments contre l'existence de la pointe thermique :

(a) on n'a pas trouvé de modification chimique dans la zone endommagée d'un solide moléculaire,

(b) par contre, on a constaté l'existence des cavités dans les métaux irradiés. Ces deux constatations sont en contradiction avec l'hypothèse de l'élévation locale de la température. En effet, s'il y a élévation locale de la température, on devrait trouver des modifications chimiques dans les solides qui ont une composition chimique instable et on ne devrait pas trouver de cavités dans les métaux puisque toutes les lacunes seraient réoccupées par les interstitiels.

SEEGER [80] pense que, grâce aux séquences de remplacements provoqués par la focalisation, on peut évacuer rapidement et très loin l'énergie cinétique de l'atome incident et aussi provoquer la création de l'interstitiel loin de la lacune. Ce modèle a deux conséquences :

(a) il supprime l'hypothèse de la pointe thermique et

(b) il permet la création de paires de FRENKEL plus stables grâce à l'augmentation de la distance lacune-interstitiel.

Avec ce modèle, nous commençons déjà à aborder le problème de l'influence de la structure cristalline des solides.

III - INFLUENCE DE LA STRUCTURE CRISTALLINE DU SOLIDE.

3.1 - Généralités.

Un projectile dans un solide cristallin peut se trouver dans l'une des trois situations suivantes (figure II-4) :

(a) Le support de son vecteur-vitesse initiale se trouve à mi-distance des rangées atomiques. Le projectile peut parcourir une très longue distance sans être freiné par autre chose que par des frottements électroniques et des collisions à faible échange d'énergie avec les atomes qui entourent sa trajectoire. C'est la canalisation.

(b) Le support du vecteur vitesse initiale se trouve très proche d'une rangée atomique et le projectile est arrêté net par le premier atome qu'il a frappé. Dans un cristal où les atomes ont à peu près le même nombre atomique, il peut alors y avoir focalisation. Le premier atome frappé prend la quasi-totalité de son énergie et vient frapper l'atome suivant qui se trouve sur la même rangée. Le deuxième atome frappé est arrêté par un troisième qui se trouve lui aussi sur la même rangée et auquel il communique la quasi-totalité de son énergie. Le même événement se répète ainsi de suite jusqu'à ce que le dernier atome frappé ait reçu une énergie trop fai-

ble pour parcourir la distance interatomique. C'est la focalisation et la séquence de remplacements qui en découle.

(c) Le support du vecteur vitesse initiale se trouve entre les deux cas extrêmes cités plus haut.

Dans ce dernier cas, on pense que l'influence du réseau cristallin est faible. Par contre, dans les deux premiers cas, il est évident que l'influence du réseau cristallin est capitale. La canalisation et la focalisation, par des collisions à faibles échanges d'énergies ou à échanges quasi-intégraux d'énergies, conduisent à des comportements des projectiles et des créations de défauts totalement différents de ceux prévus pour les solides amorphes.

3.2 - Canalisation et focalisation.

3.2.1 - La canalisation.

Malgré les prévisions de STARK [81] depuis 1912, on admettait jusqu'au début des années soixante, que les particules qui pénètrent dans un cristal se conduisent pratiquement comme dans un milieu amorphe. Les anomalies dans la profondeur de pénétration des ions implantés suivant certaines directions cristallines observées par BREDOV et OKUNEVA [82] et DAVIES et col. [83-86] ou la baisse du taux d'éjection dans un bombardement suivant une direction cristalline à faible indice observée par ROL et col. [87] et ALMEN et BRUCE [88] ne reçoivent pas d'explications ou bien sont expliquées par une théorie de la "transparence" proposée par SOUTHERN et col. [69].

Avec les premières simulations numériques de ROBINSON et OEN [36 à 39] on a enfin compris que la "transparence cristalline" n'explique pas toutes les observations, mais qu'en réalité une certaine "canalisation" est provoquée par des collisions à très faibles échanges d'énergie quand le projectile est orienté dans une certaine direction à faibles indices. Plusieurs expériences menées à CHALK-RIVER [83-86], à HARWELL [90] et à l'Université de MUNICH [91] confirmèrent l'existence de la canalisation. Au point de vue théorique, des calculs ont été faits par LEHMANN et LEIBFRIED [92] pour la canalisation à faible énergie et par NELSON et THOMPSON [90] pour la canalisation à haute énergie.

3.2.2 - La focalisation.

L'existence de la focalisation est prévue par SILSBEE [93] en 1957 par un raisonnement basé sur la collision binaire entre sphères dures. Cependant, aucune expérience convaincante n'a encore pu la mettre en évidence.

La focalisation se fait de préférence suivant les rangées de grande densité atomique.

Dans les directions de grande densité atomique, les barrières de potentiel créées par les autres atomes du solide sont plus faibles. L'atome incident qui a une énergie cinétique inférieure à la barrière de potentiel moyenne peut se trouver dans deux cas :

(a) sa vitesse est orientée dans une direction très différente de la direction de grande densité atomique et il est arrêté,

(b) sa vitesse est orientée dans une direction proche de la direction de grande densité atomique et il peut traverser cette barrière si celle-ci est plus basse que son énergie cinétique. Donc, s'il y a focalisation, il ne peut y en avoir que suivant les directions de grande densité atomique.

3.2.3 - Facteur de focalisation.

Les simulations numériques avec des modèles d'interactions multiples réalisées par HARRISON et col. [27, 29-31] et VINEYARD et col. [24-26, 28, 47] ont montré l'existence de la focalisation des collisions suivant les directions de grande densité atomique. Le groupe de BROOKHAVEN [24-26, 28, 47] a pu calculer par simulation le facteur de focalisation, c'est-à-dire le facteur Λ défini par

$$\theta_n = - \Lambda \theta_{n+1} \quad (\text{II.18})$$

θ_n, θ_{n-1} = respectivement angles de déviation des trajectoires des $n^{\text{ième}}$ et $(n-1)^{\text{ième}}$ atomes par rapport à la direction de focalisation.

Le facteur de focalisation est le rapport des angles que font les trajectoires de deux atomes successifs de la rangée de collisions avec la direction de cette rangée. Si le facteur de focalisation Λ est supérieur à l'unité, les angles que font les trajectoires des atomes successifs de la rangée de collisions avec cette rangée tendent à augmenter et la chaîne de collisions peut s'arrêter à une certaine distance sans que tous les atomes soient arrêtés.

Si le facteur de focalisation Λ est inférieur à l'unité, ces angles tendent à diminuer ce qui permet d'avoir des collisions de plus en plus frontales et d'allonger ainsi les chaînes de collisions jusqu'à ce que tous les atomes soient arrêtés (figure II-5).

LEIBFRIED et col. [94, 95] et NELSON et col. [96-98] ont évalué analytiquement le facteur de focalisation Λ . Le groupe de BROOKHAVEN l'a évalué par simulation. Il ressort de leurs calculs que la focalisation est un phénomène qui a lieu dans le domaine des énergies inférieures à une vingtaine d'électron-volts et que la focalisation est fortement favorisée par les atomes entourant la rangée de focalisation.

3.3 - Influence sur les effets d'irradiation.

Comme nous l'avons dit au paragraphe 3.1, la canalisation augmente le parcours de l'atome incident et la focalisation bloque l'atome incident au premier proche voisin. Mais comme la focalisation, par des remplacements atomiques qu'elle provoque, transmet l'énergie du premier atome frappé sur de très grandes distances, nous pouvons conclure que la canalisation et la focalisation ont pour effet d'élargir la taille de la zone endommagée. La canalisation a tendance à diminuer la création des défauts et la focalisation, au contraire, a tendance à l'augmenter.

Quand il y a canalisation, l'énergie reçue par l'atome cible est faible puisque l'angle de déviation dans le système du centre de masse est petit devant l'unité et qu'elle est d'autant plus faible que l'énergie cinétique de l'atome incident est importante. Comme l'atome cible reçoit une énergie faible, il ne peut y avoir qu'un déplacement trop faible pour créer une paire de FRENKEL et cette énergie est perdue pour le processus de création des défauts. Avec la vibration thermique, cependant il peut y avoir quelques atomes qui se rapprochent suffisamment près de la trajectoire de l'atome incident pour recevoir une énergie assez grande pour qu'il y ait création de défauts.

Au contraire, la focalisation augmente le nombre de défauts stables créés. On démontre que la barrière de potentiel est plus basse dans une direction de focalisation, on peut donc avoir un déplacement atomique, donc une possibilité de créer

des défauts dans cette direction même avec une énergie cinétique qui, normalement, est incapable de provoquer un déplacement atomique. Donc, pour une énergie cinétique initiale donnée du premier atome frappé, la focalisation permet d'augmenter le nombre de déplacements atomiques et celui de la création des défauts.

Par une succession de remplacements atomiques avec des collisions quasi-frontales, on a finalement un interstitiel très éloigné de la lacune qui se trouve au site de l'atome incident initial. Donc, en cas de focalisation, les séquences de remplacements allongent la moyenne des distances lacunes-interstitiels et certaines recombinaisons immédiates des paires de FRENKEL peuvent devenir impossibles.

IV - INFLUENCE DE LA NATURE DE LA PARTICULE INCIDENTE.

Dans ce travail, nous appelons particules légères les particules dont la masse est égale à environ celle du carbone et particules lourdes celles dont la masse est supérieure à environ celle du carbone. Comme nous étudions principalement les effets d'irradiation par neutrons rapides, les particules que nous utilisons ont une énergie cinétique initiale telle qu'elles produisent des effets d'irradiation de même ordre de grandeur que ceux produits par les neutrons rapides. Etant données les différences de sections efficaces et des rapports de masse l'aspect physique des effets d'irradiation change quand la particule incidente est lourde ou légère.

4.1 - Irradiation aux particules légères.

Comme exemple d'irradiation aux particules légères, nous étudions l'irradiation aux neutrons rapides. La physique du problème d'irradiation aux autres particules n'est pas très différente, il suffit de tenir compte du frottement électronique quand il s'agit de particules électriquement chargées.

4.1.1 - Interaction d'un neutron rapide avec la matière.

Le solide est composée de noyaux atomiques autour desquels gravitent des électrons. Les noyaux vibrent par mouvement brownien autour des positions d'équilibre disposées de façon périodique conformément à la structure cristalline du solide, les électrons se déplacent dans l'espace inter-nucléaire. Les dimensions des neutrons et des électrons sont très petites par rapport à celles des distances interatomiques. L'électron est chargé électriquement alors que le neutron ne l'est pas. La masse du neutron est 1846 fois supérieure à celle de l'électron. Par conséquent :

- (a) il n'y a aucune interaction à distance entre neutron et électron,
- (b) la probabilité de collision neutron-électron est quasi nulle,
- (c) s'il y a quand même une collision entre un neutron et un électron, les variations de l'énergie cinétique du neutron et de la trajectoire du neutron sont négligeables devant l'énergie cinétique du neutron et devant son parcours entre deux collisions avec un noyau. Nous pouvons donc supposer que :

- (a) la configuration électronique du métal n'a pas d'influence sur le résultat du problème,
- (b) entre deux collisions avec les noyaux, le neutron ne perd pas d'énergie et sa trajectoire est rectiligne.

La figure II-6 donne l'exemple des réactions nucléaires possibles provoquées par un neutron rapide avec le fer. Avec des neutrons de réacteurs à fusion qui ont une énergie moyenne d'une centaine de MeV toutes ces réactions sont possibles. Mais, pour des raisons d'ordre énergétique, seules les réactions (a), (b) et (c) de

la figure II-6 sont possibles avec des neutrons d'un réacteur surgénérateur. Seule la réaction (a), c'est-à-dire la collision élastique, est à tenir compte parce que les deux autres réactions sont de sections efficaces très faibles par rapport à celle de la réaction (a). Pour les autres métaux tels que le cuivre, l'or, ..., nous avons la même conclusion : les transmutations nucléaires sont négligeables et il suffit de considérer les collisions élastiques.

4.1.2 - Cascades de défauts créées par neutrons rapides.

Les neutrons rapides issus des réacteurs à neutrons rapides ont une énergie moyenne de 1 MeV, donc une longueur d'onde de Broglie de 28.5×10^{-8} m et, à l'approche de la fin de leur parcours (vers une trentaine d'électron-volts) la longueur d'onde de de Broglie est de 4.82×10^{-14} m. Ces longueurs d'ondes sont donc assez petites par rapport aux distances inter-atomiques pour que le neutron puisse être considéré, non pas comme une onde, mais comme une particule, et assez grandes par rapport aux dimensions des noyaux atomiques pour que le neutron puisse agir sur le noyau dans son ensemble et non pas sur chaque nucléon pris séparément. Le noyau vibre à la fréquence de 10^{13} Hz environ et avec une amplitude de $0,5 \text{ \AA}$ environ. Sa vitesse maximale est donc de 500 m/s environ. En comparant avec celle d'un neutron d'un MeV qui est de 14×10^6 m/s, soit environ 5 pour cent de la vitesse lumière, nous pouvons supposer que, dans la collision neutron-noyau, le noyau est déplacé de sa position d'équilibre, mais est immobile par rapport au mouvement du neutron. Comme un neutron d'un réacteur surgénérateur n'a qu'une énergie maximale de 10 MeV c'est-à-dire que sa vitesse est environ 15 pour cent de la vitesse de la lumière, nous pouvons négliger la correction relativiste et traiter le problème par la mécanique classique.

Le libre parcours moyen du neutron dans un métal est de l'ordre de quelques centimètres, c'est-à-dire entre 10^8 et 10^9 distances interatomiques. Comme une cascade a un diamètre de l'ordre d'une cinquantaine à une centaine de distances interatomiques, et que sa durée de vie est estimée à 10^{-8} seconde au maximum, il y a peu de chance pour que deux cascades se recouvrent. La taille d'un grain de métal ne dépassant pas quelques millimètres, il est donc rare pour que deux premiers atomes frappés par un même neutron se trouvent dans un même grain ou même dans deux grains trop proches voisins.

Dans un morceau de métal, les grains ont des orientations diverses et non corrélées, on peut donc considérer les vitesses initiales des premiers atomes frappés comme réparties d'une façon isotrope.

Etant données les différences de masses entre celle du neutron et celle d'un atome de métal, à chaque collision avec un noyau, le neutron ne perd au maximum que dix pour cent de son énergie. Il peut donc y avoir un grand nombre de premiers atomes frappés avec un seul neutron et que ces premiers atomes frappés reçoivent une énergie moyenne entre cinquante et trois cent kilo-électron-volts.

4.2 - Irradiation aux particules lourdes.

On peut aussi irradier avec des particules lourdes telles que les ions de gaz rares ou de métaux. Les différences avec les particules légères en sont les suivantes :

- Elles ont une masse équivalente à celle des atomes du solide irradié et peuvent donc communiquer une grande part de leur énergie aux atomes du solide.

- Elles ont une grande section efficace et entrent donc en collision avec les premiers atomes à la surface du solide.

Avec ces deux différences :

(a) les particules lourdes peuvent provoquer elles mêmes la création des cascades et n'ont pas à passer par l'intermédiaire d'un premier atome frappé,

(b) les cascades sont proches de la surface et non réparties dans tout le volume du solide (figure II-7). Quand une cascade est créée à l'intérieur du solide, les atomes chassés de leur site restent à l'intérieur du solide alors que, quand la cascade est créée à proximité d'une surface, les atomes de la surface qui sont chassés de leur site peuvent être éjectés hors du solide (figure II-8). Parfois, la particule incidente elle-même peut aussi être renvoyée hors du solide (figure II-9).

La concentration des cascades près de la surface du solide est la principale différence avec l'irradiation aux particules légères. Cette concentration près de la surface entraîne une différence dans les interactions entre les défauts créés et entre les défauts créés et les puits de défauts du solide.

Une deuxième différence tient au fait qu'on profite de la facilité de création des cascades avec des particules lourdes pour en augmenter le nombre. Cette augmentation du nombre de cascades multiplie les changements d'interactions entre les défauts entre eux et entre les puits de défauts que nous avons cités plus haut. On peut essayer de supprimer cet inconvénient en remplaçant le flux de particules lourdes par un flux plus intense et plus énergétique de particules légères. Mais, dans ce cas, la physique du gonflement sous irradiation change car les particules légères risquent de se regrouper en bulles gazeuses à l'intérieur du solide, donc de créer des puits parasites de défauts.

Une troisième différence est l'orientation de l'impulsion communiquée au premier atome frappé par rapport au réseau cristallin. Si les points d'impact des particules lourdes avec la surface du solide sont distribués aléatoirement sur la surface du solide, il n'en est pas de même pour la direction de la vitesse initiale du premier atome frappé (qui est la particule incidente elle-même). En effet, la vitesse initiale du premier atome frappé dépend de la direction du flux et de l'orientation du grain par rapport à la surface irradiée. Cette dernière différence fait que la simulation numérique de l'irradiation aux particules légères doit être différente de celle de l'irradiation aux particules lourdes.

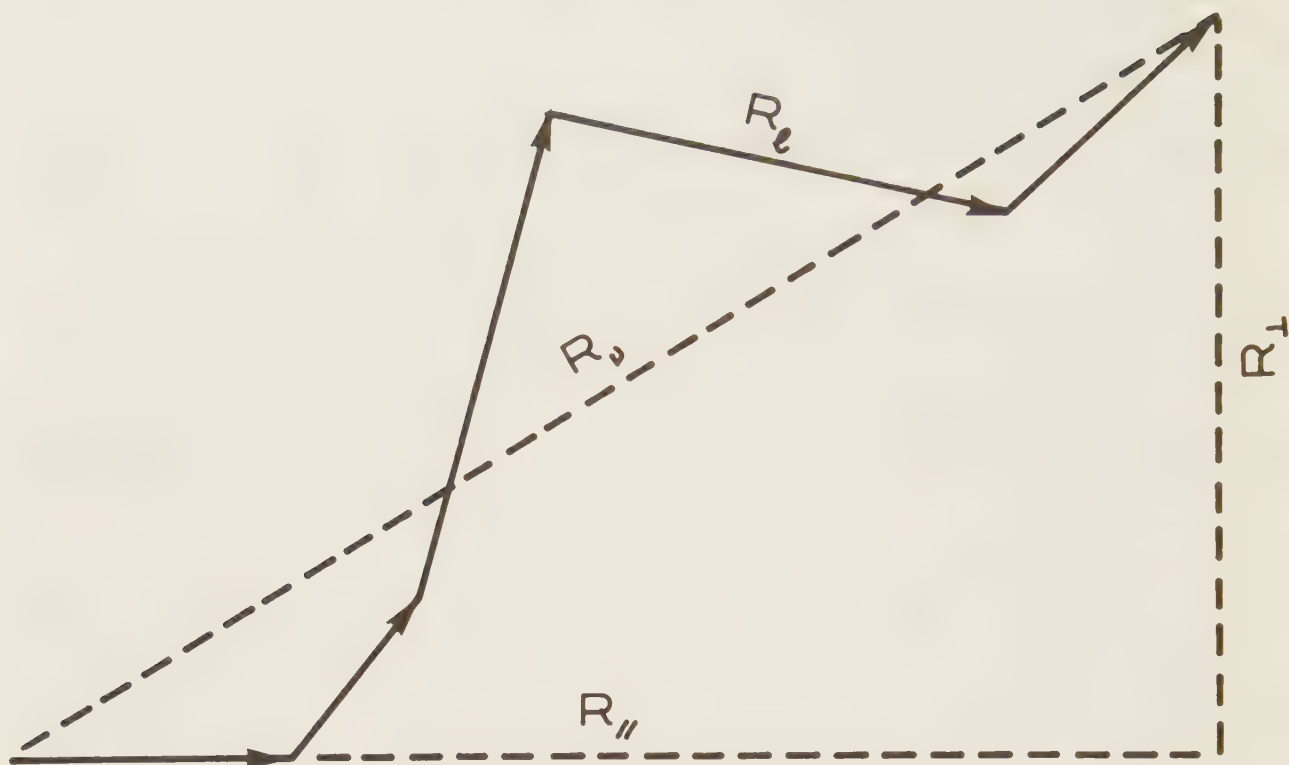


Figure II-1
Paramètres définissant le parcours d'une particule

énergie de la cible ↑ le projectile s'arrête la cible s'en va donc un déplacement atomique supplémentaire pas de création de défaut	le projectile continue son chemin la cible s'en va donc un déplacement atomique supplémentaire une création de lacune
le projectile s'arrête la cible reste donc pas de déplacement atomique supplémentaire pas de création de défaut	le projectile continue son chemin la cible reste donc pas de déplacement atomique supplémentaire pas de création de défaut

E_d

énergie du projectile

Figure II-2
Principe du modèle de KINCHIN et PEASE [71]

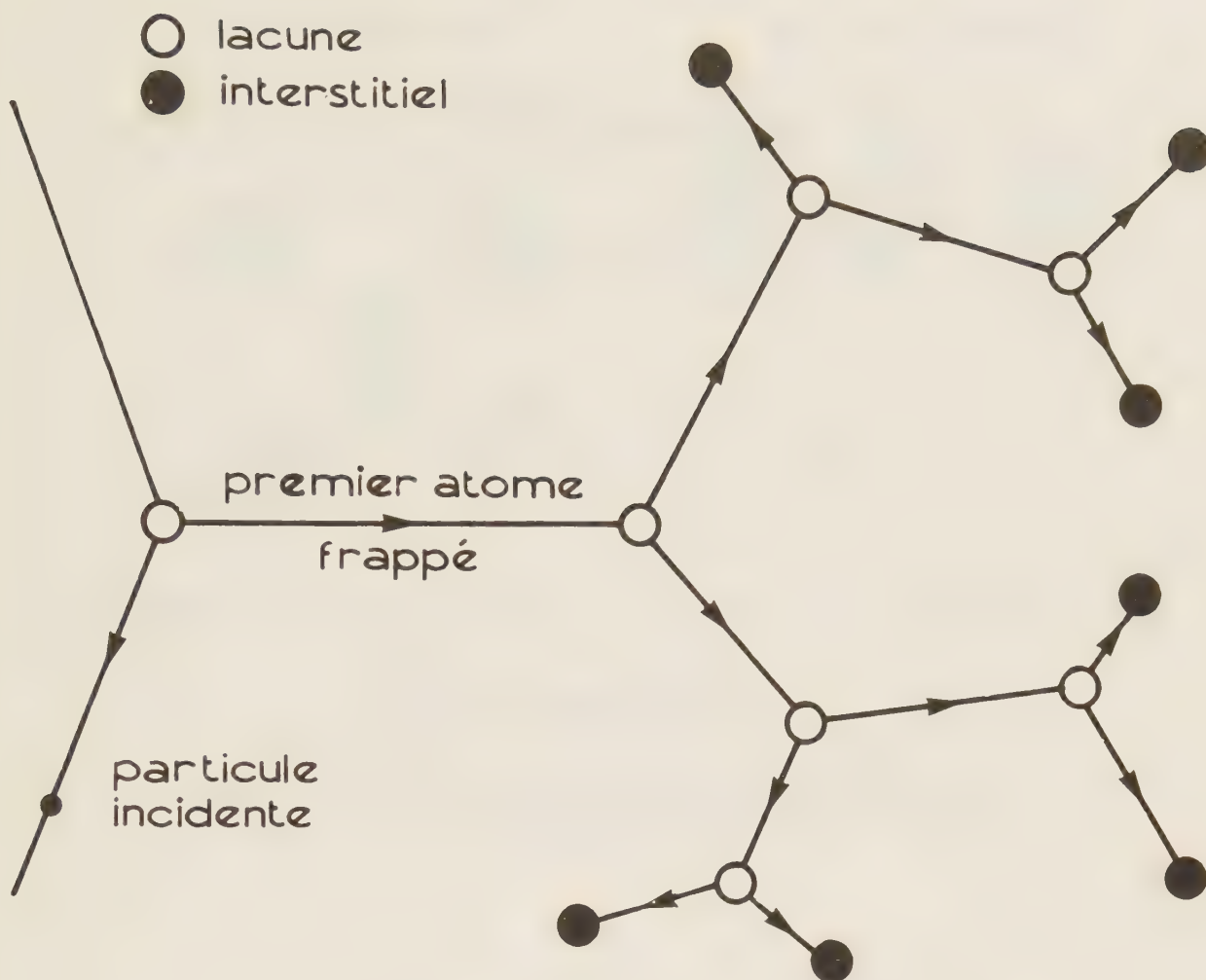


Figure II-3
Création des défauts d'après le modèle
de KINCHIN et PEASE [71]



Figure II-4
Parcours possibles d'une particule dans un réseau cristallin



$\Lambda \geq 1.$



$\Lambda < 1.$

Figure II-5

Collisions sur une rangée de grande densité atomique

En haut, le facteur de focalisation est supérieur à l'unité
En bas, le facteur de focalisation est inférieur à l'unité

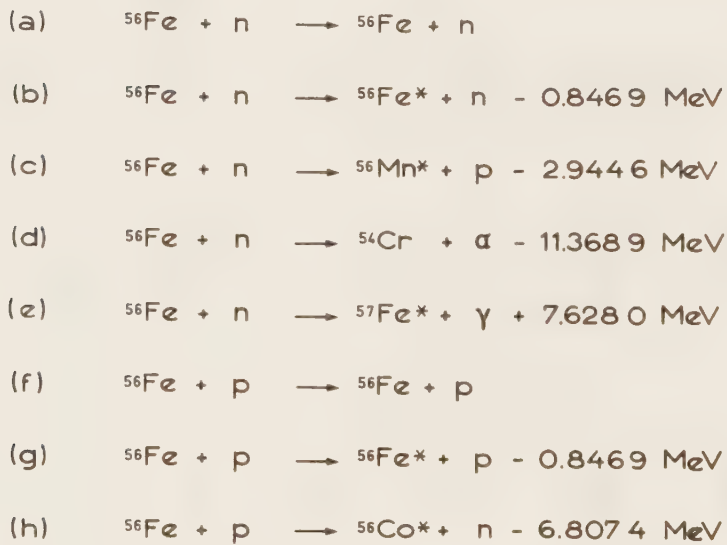


Figure II-6

Réactions nucléaires possibles dans l'irradiation du fer
par des neutrons rapides

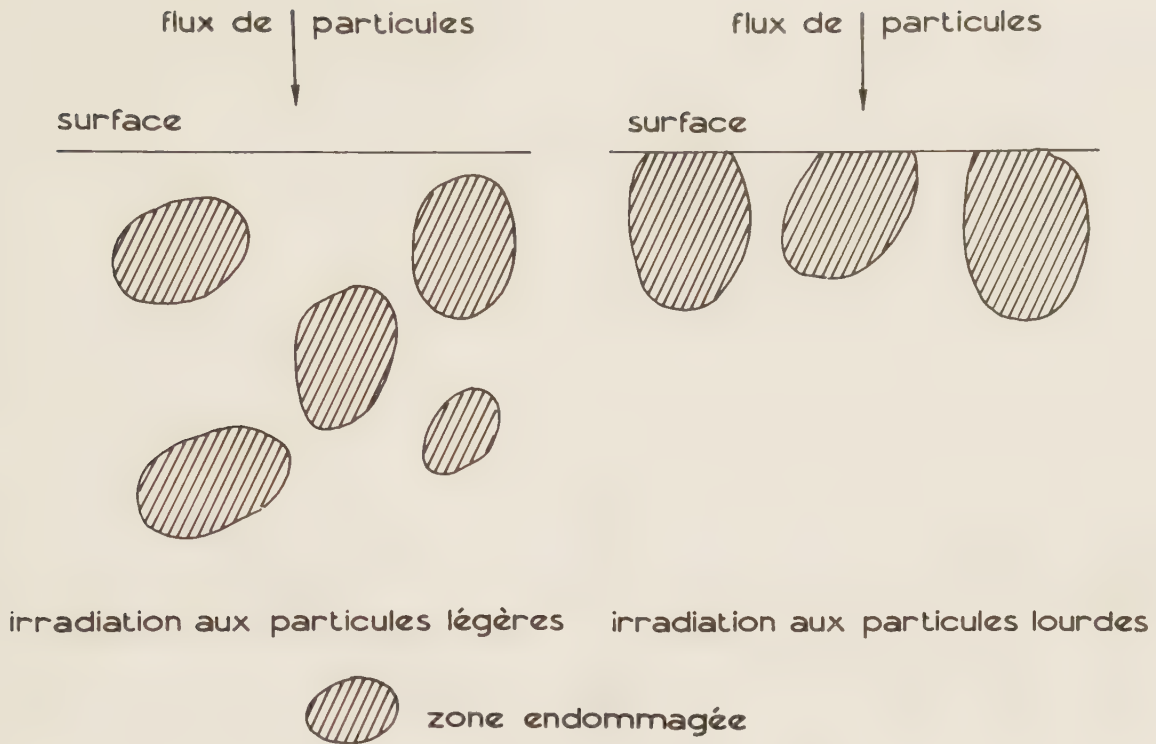


Figure II-7

Différence entre irradiation aux particules légères
et aux particules lourdes

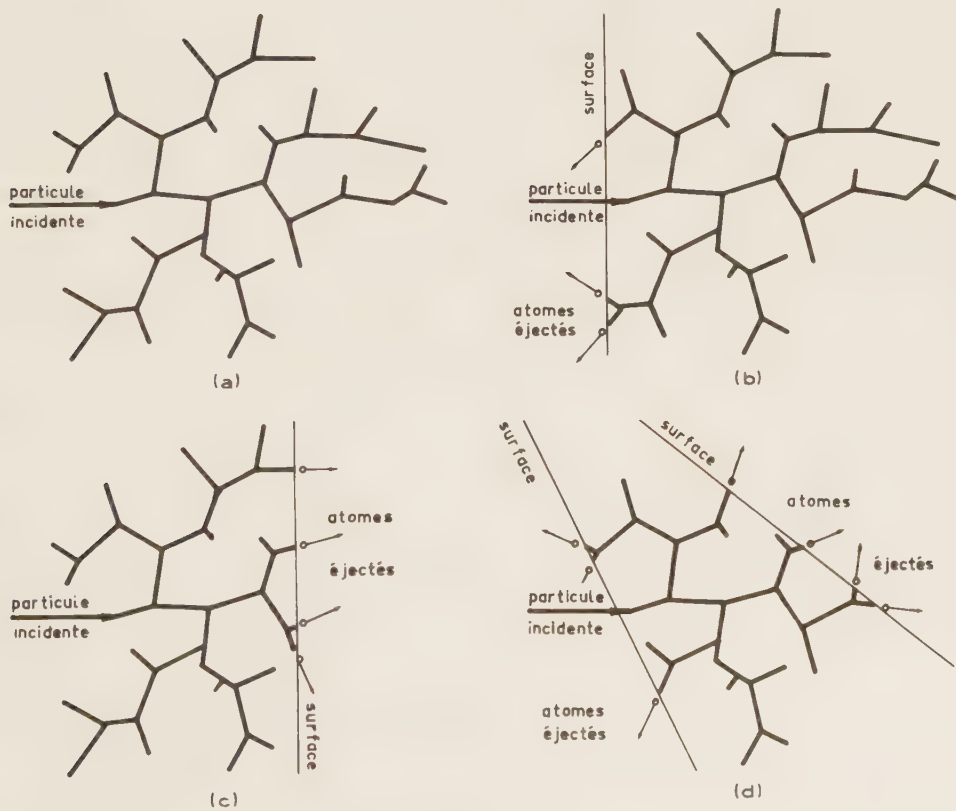


Figure II-8

Position des cascades par rapport aux surfaces

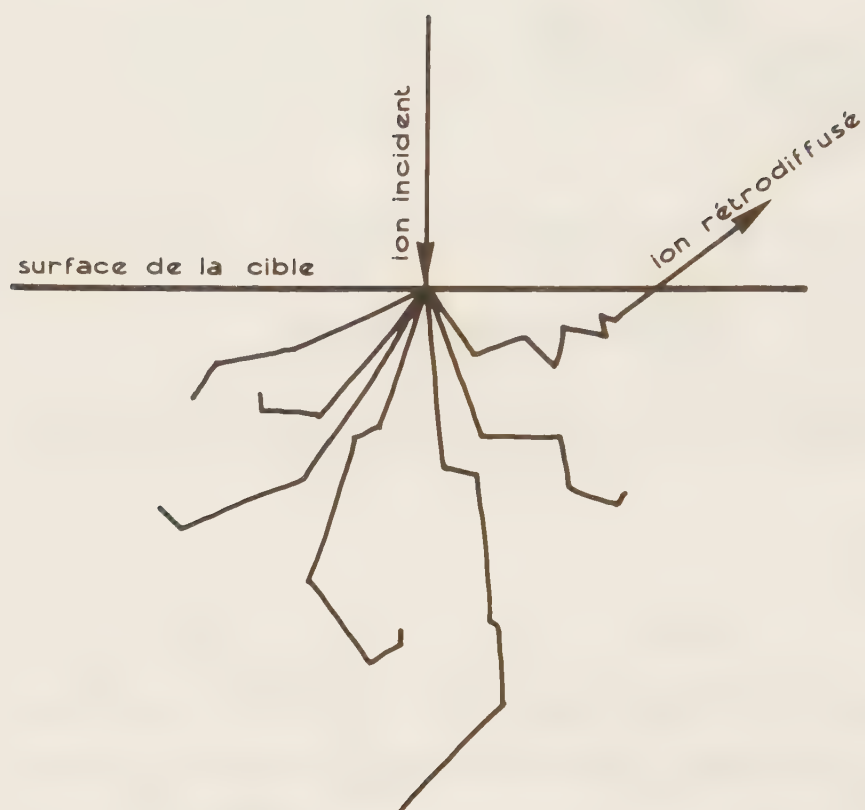


Figure II-9
Quelques parcours d'ions incidents dans un solide

Chapitre III

ASPECTS METHODOLOGIQUES DU PROBLEME

Comme nous l'avons dit en introduction, étant donnés les moyens techniques dont nous disposons actuellement, nous ne pouvons résoudre notre problème de façon satisfaisante qu'avec l'aide d'un ordinateur. Nous préférons laisser le Professeur BENZECRI [99] introduire ce chapitre.

"Utiliser un ordinateur implique d'abandonner toutes techniques conçues avant l'avènement du calcul automatique. Je dis techniques, non science : les principes, géométriques ou algébriques, de nos programmes étaient connus de Laplace, il y a 150 ans. Mais Laplace est également l'auteur d'un traité de mécanique céleste qu'on vient de rééditer à l'usage des techniciens de l'espace ... Cela n'a pas suffi à Napoléon pour conquérir la lune ! "

Changer de techniques implique changer aussi de méthodes de pensée et de méthodes de travail. Utiliser un ordinateur comme une machine à calculer ou un fichier perfectionné nous semble ne pas savoir tirer le maximum de cette merveilleuse machine. La rapidité des calculs nous permet de nous lancer dans des techniques inabordables sans ordinateur telles la simulation numérique et l'analyse factorielle, deux techniques couramment utilisées en sciences humaines.

Dans ce chapitre, nous montrons l'intérêt de ces deux techniques dans les sciences physiques et leur adaptation à l'étude des effets d'irradiation dans un solide cristallin (paragraphes I et II), puis nous donnons une brève description des principaux programmes que nous utilisons (paragraphe III).

I - LA SIMULATION NUMERIQUE.

La simulation numérique a pris un grand essor ces dernières années sous l'impulsion de chercheurs en économie d'entreprise et grâce à l'apparition de gros ordinateurs. Elles est utilisée en sciences physiques d'une façon assez anarchique, soit pour éviter un calcul fastidieux, soit pour reproduire une expérience. Nous pensons donc qu'il est nécessaire de faire une mise au point de notre opinion sur cette méthode d'investigation.

I.1 - Définition de la simulation numérique.

La simulation numérique est différente de la simulation physique par la nature abstraite du modèle mis au point et de la théorie abstraite par l'utilisation à la fois déductive et inductive du modèle.

La simulation physique est pratiquée depuis longtemps par des ingénieurs (modèles réduits et circuits électroniques). On ne cherche pas à faire une représentation exacte de la réalité, même pas aux dimensions près, mais un modèle qui représente les traits essentiels du problème que l'on étudie. En physique, par exemple, on remplace l'étude des effets d'irradiation aux neutrons rapides par une irradiation aux ions lourds. Comme nous l'avons vu au Chapitre II, on ne crée pas exactement le même phénomène, mais sur certains points comme la création des cavités ou l'accélération de la diffusion atomique, on pense avoir des résultats analogues.

La simulation numérique par contre, utilise des modèles abstraits appelés souvent modèles mathématiques parce qu'ils font appel à un langage mathématique. L'utilisation d'un modèle abstrait n'est pas la caractéristique de la simulation numérique puisque toute théorie scientifique fait appel à un modèle abstrait. Mais une théorie ne peut avoir qu'une utilisation déductive (à partir de la théorie de KINCHIN et PEASE, on déduit le nombre d'atomes déplacés par une particule d'énergie donnée [71]) même si sa mise au point est inductive.

Une simulation numérique peut avoir une utilisation déductive et inductive, ce qui la situe entre la théorie et l'expérience. Avec un modèle de simulation de la relaxation des atomes, on peut calculer l'énergie de liaison des amas de défauts d'après le modèle choisi de potentiel interatomique, mais on peut aussi, par essais successifs, trouver la configuration d'un interstitiel ou la distance minimale d'une paire de FRENKEL. En utilisant le modèle de création des défauts par irradiation, on peut induire certaines lois sur la répartition des défauts comme nous pourrions le constater au chapitre V. On appelle cette façon de procéder, faire une expérience sur le modèle abstrait. Si le modèle est implanté dans un ordinateur, on dit qu'on fait une expérience à l'ordinateur.

Ainsi la simulation numérique permet d'extraire des lois phénoménologiques simples ou des paramètres de lois quand une analyse physique du problème est trop compliquée pour permettre de le faire. Mais il ne faut pas oublier que, si elle cumule les avantages de la théorie et de l'expérience, elle en cumule aussi les inconvénients. Notamment, elle est basée sur des hypothèses théoriques et que les lois ou paramètres obtenus par cette méthode ne sont valables que s'ils ne sont pas en contradiction avec les expériences physiques.

1.2 - Intérêts de la simulation numérique.

La simulation numérique en gestion d'entreprise a pour objectif unique l'aide à la décision. La simulation numérique en sciences physiques permet d'atteindre les trois objectifs de la recherche en physique :

- la description d'un processus,
- le test d'une hypothèse,
- l'obtention d'une donnée numérique.

Les méthodes traditionnelles d'investigation ne permettent d'atteindre directement au maximum que deux de ces trois objectifs. Une théorie physique ne permet que de décrire un processus ou de calculer une valeur numérique, mais, hypothèses non fingo, elle ne permet pas de tester une hypothèse. Une expérience de physique permet de tester une hypothèse ou d'obtenir une valeur numérique, mais ne permet pas de décrire un processus. La simulation numérique, qui se situe entre la théorie et l'expérience, cumule les avantages de l'une et de l'autre. En voici quelques exemples :

(a) Description d'un processus. On sait que le gonflement des métaux dans un réacteur est provoqué par des neutrons rapides, mais on veut connaître le processus qui conduit à l'interaction d'un neutron rapide sur les atomes du métal à un phénomène, le gonflement. Un modèle de simulation numérique permet de décrire ce processus parce qu'il indique pour chaque instant le mouvement de chaque atome du métal.

(b) Test d'une hypothèse. On soupçonne que la présence de gaz change le gonflement des métaux sous irradiation. On bâtit un modèle de simulation numérique qui tient compte de l'interaction des atomes du gaz avec ceux du métal. Si les résultats changent dans le sens voulu, l'hypothèse est vérifiée.

(c) Obtention d'une donnée scientifique. On veut avoir la distance parcourue par un ion dans un solide. On fait un grand nombre de simulations numériques de parcours d'ions dans un solide. On obtient la moyenne et la distribution spatiale des parcours atomiques.

A ces avantages apparents, nous pensons qu'il convient d'ajouter un avantage psychologique. Dans les entreprises, la mise sur ordinateur de la gestion est souvent une occasion inespérée pour réfléchir sur l'intérêt de telle ou telle tâche, de telle ou telle façon de travailler. En sciences physiques, la mise au point d'une théorie est aussi une occasion pour examiner la validité d'un grand nombre d'hypothèses. La mise au point d'un modèle de simulation numérique est alors une vaste remise en question de toutes les théories couramment acceptées puisqu'un modèle de simulation numérique n'est rien d'autre que la combinaison de plusieurs théories. C'est cette vaste remise en question qui nous paraît être l'intérêt essentiel de la simulation numérique.

1.3 - Apports de l'ordinateur.

Tous les avantages de la simulation numérique n'existeraient que sur le papier s'il n'y avait pas un instrument de calcul rapide.

Le temps de réponse d'un ordinateur moderne est tellement bref que le dialogue entre le chercheur et la machine est devenu possible. Avec les langages évolués de programmation tels que ALGOL, FORTRAN, PL/1 ou APL la mise au point des programmes de calcul devient très simple. Le chercheur n'hésite donc pas à tester toutes les hypothèses qui lui viennent à l'idée. Comme il obtient rapidement l'information ou la confirmation de ses hypothèses, on peut dire que l'ordinateur a multiplié sa créativité et sa productivité (nous définissons la productivité d'un chercheur par le rapport des informations scientifiques qu'il a obtenues sur son temps de travail).

Nous pensons que nos modèles de simulation nous ont servi beaucoup plus comme aide à l'imagination que comme instrument scientifique en lui-même. Comme nous le verrons aux chapitres IV et V, les résultats que nous obtenons dépendent beaucoup des modèles théoriques que nous utilisons. Il n'est donc pas question pour nous d'essayer d'obtenir une quelconque donnée numérique, mais grâce à de nombreuses expériences à l'ordinateur, nous pouvons proposer un processus de création des défauts et confirmer ou infirmer les hypothèses couramment admises.

II - L'ANALYSE FACTORIELLE.

Comme nous le verrons au chapitre V, pour étudier l'influence des données du modèle MARLOWE, nous devons simuler numériquement environ 1400 cascades pour obtenir au total environ 38000 informations à manipuler. Avec les moyens statistiques classiques, nous aurions 3500 courbes à étudier pour connaître l'influence de

seulement cinq principales données du modèle MARLOWE. Nous n'insistons donc pas sur l'intérêt de l'analyse factorielle. Nous nous contentons d'en exposer les principes et l'usage que nous en faisons. Plusieurs chercheurs en sciences humaines utilisent l'analyse factorielle pour obtenir des résultats chiffrés. En physique, les résultats quantitatifs peuvent être obtenus d'une façon plus rigoureuse. Aussi, ne nous intéressons-nous qu'aux résultats qualitatifs de l'analyse factorielle.

2.1 - Principes de l'analyse factorielle.

Nous appelons analyse factorielle l'analyse linéaire d'un tableau de données en vue de classer un ensemble I d'individus ou un ensemble C de caractères. Quoique les caractères puissent être quantitatifs ou qualitatifs, les caractères que nous traitons dans notre travail sont quantitatifs, ce sont les paramètres qui caractérisent une cascade de défauts et qui sont définis en annexe II.

Nous notons $X = \parallel x_j^i \parallel$ la matrice (n x p) qui contient toutes les informations sur les p caractères de l'ensemble des n individus. x_j^i est la valeur du j^{ième} caractère ($j \in C$) du i^{ième} individu ($i \in I$). Aux colonnes (individus) de la matrice X sont associés les vecteurs

$$x_i = \begin{pmatrix} x_i^1 \\ x_i^2 \\ \vdots \\ x_i^p \end{pmatrix} \quad (i = 1, \dots, n) \quad (\text{III.1})$$

Aux lignes (caractères) de la matrice X sont associés les vecteurs

$$x^j = \begin{pmatrix} x_1^j \\ x_2^j \\ \vdots \\ x_n^j \end{pmatrix} \quad (j = 1, \dots, p) \quad (\text{III.2})$$

Nous avons ainsi défini deux espaces vectoriels :

- L'espace I de dimension p défini dans $\mathbb{R}^p$ où se trouve le nuage $\mathcal{I}$ des n individus x_i ,
- L'espace C de dimension n défini dans $\mathbb{R}^n$ où se trouve le nuage $\mathcal{C}$ des p caractères x^j .

Le problème ainsi posé présente une symétrie de rôle entre individus et caractères. Le raisonnement qui suit concerne les individus, mais, en changeant les indices, il est aussi appliqué aux caractères.

Quand deux individus sont identiques, les composantes des vecteurs de I qui les représentent sont identiques et les projections de ces vecteurs sur un sous-espace quelconque de $\mathbb{R}^p$ sont superposées. Quand ces deux individus présentent une légère différence, les composantes de leurs vecteurs représentatifs sont aussi lé-

gèrement différentes et les projections de ces vecteurs sur un sous-espace quelconque de $\mathbb{R}^p$ sont proches l'une de l'autre. Notre problème sera donc de choisir un sous-espace de $\mathbb{R}^p$ de dimension inférieure à p tel que les projections des vecteurs du nuage $\mathcal{J}$ mettent en évidence les ressemblances et dissemblances entre les individus. Nous pourrions alors avoir les cinq cas suivants :

- Une population dont les individus se ressemblent beaucoup aura des vecteurs représentatifs projetés en un nuage compact de points ;
- Un individu qui est très différent d'une population donnée aura la projection de son vecteur représentatif très éloignée du nuage des projections des vecteurs représentatifs de la population ;
- Au contraire, si cet individu ressemble aux individus de la population considérée, la projection de son vecteur représentatif se trouvera au milieu du nuage des projections des vecteurs représentatifs de la population ;
- Deux populations d'individus différents auront les projections de leurs vecteurs représentatifs regroupées en deux nuages de points différents ;
- Au contraire, si ces deux populations se ressemblent, leurs vecteurs représentatifs se projetteront en un même nuage de points.

Une population dont les individus sont caractérisés par un seul caractère (quand le caractère est qualitatif) ou dont tous les caractères sont nuls sauf un (quand ce caractère est quantitatif) a des vecteurs représentatifs alignés parallèlement à l'axe représentant ce caractère. Les vecteurs d'une telle population se projettent donc sur la projection de cet axe sur le sous-espace considéré. Inversement, si, sur le sous-espace, les projections des vecteurs représentatifs d'une population se regroupent près de la projection d'un axe, nous pouvons dire que cette population est caractérisée par le caractère représenté par cet axe. Par conséquent, quand deux caractères ont leurs axes représentatifs projetés suivant une même droite ils caractérisent la même population ou groupe de populations et, dans ce cas, nous pouvons ne tenir compte que d'un seul caractère dans notre étude.

Nous disons que nous faisons une analyse discriminante quand nous voulons classer un individu dans une des populations du nuage $\mathcal{J}$. Nous disons que nous faisons une analyse des correspondances quand nous faisons correspondre une population d'individus à une population de caractères.

2.2 - Mise en oeuvre de l'analyse factorielle.

D'après ce que nous avons dit au paragraphe 2.1, tout le problème consiste à trouver une définition de la "ressemblance" entre deux individus ou deux caractères. Nous définissons la ressemblance entre deux individus ou deux caractères par la distance entre leurs vecteurs représentatifs.

Nous rappelons quelques définitions mathématiques (paragraphe 2.2.1), puis nous décrivons les manipulations des données pour obtenir une analyse factorielle (paragraphe 2.2.2).

2.2.1 - Rappel de quelques définitions mathématiques.

Soit E un espace vectoriel. Une distance sur E est une application bilinéaire d de $E \times E$ dans l'ensemble $\mathbb{R}$ des nombres réels, possédant les propriétés suivantes :

- (i) $d(x, y) \geq 0$ pour tout couple d'éléments x, y de E .
- (ii) la relation $d(x, y) = 0$ est équivalente à $x = y$.

(iii) $d(x, y) = d(y, x)$ pour tout couple d'éléments x, y .

(iv) $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$ quels que soient les trois éléments x, y, z de E .

La dernière inégalité s'appelle inégalité du triangle.

Un espace métrique est un espace vectoriel E sur lequel est donnée une distance d .

La distance euclidienne dans un espace $\mathbb{R}^p$ est définie par

$$d(x, y) = \left[\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2 \right]^{1/2}$$

avec

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_p \end{pmatrix}$$

Un espace métrique qui est muni d'une distance euclidienne est appelé espace euclidien.

Deux sous-espaces X et Y sont complémentaires de E quand

(i) La somme de leur dimension est égale à la dimension de E ;

(ii) Tout vecteur z de E peut se décomposer d'une façon unique en une somme de deux vecteurs x de X et y de Y .

x est appelé projection de z sur X parallèlement à Y et y projection de z sur Y parallèlement à X .

Un produit scalaire de deux vecteurs x et y est égal à la somme des produits de leurs composantes.

Deux sous-espaces sont dits orthogonaux quand le produit scalaire d'un vecteur quelconque de l'un avec un vecteur quelconque de l'autre est nul.

La distance d'un vecteur z au sous-espace X est la distance de sa projection parallèlement à X sur le sous-espace Y complémentaire à X de E et orthogonal à X à l'intersection des deux sous-espaces X et Y .

La somme des carrés des distances des points d'un nuage de points (éventuellement pondérée par les masses des points) au point a est appelée inertie du nuage en a .

La somme des carrés des distances des points d'un nuage de points (éventuellement pondérée par les masses des points) à un sous-espace W est appelée moment d'inertie du nuage par rapport au sous-espace W .

2.2.2 - Manipulation des données.

Nous pouvons affecter à chaque individu x_i une masse p_i dépendant de l'importance de cet individu et à chaque caractère x^j une masse q^j dépendant de l'importance de ce caractère.

Le rapport

$$g = \frac{\sum_{i=1}^n p_i x_i}{\sum_{i=1}^n p_i} \quad (\text{III.5})$$

est appelé centre de gravité de $\mathcal{J}$. Le vecteur g a pour composantes de forme générale

$$g^j = \frac{\sum_{i=1}^n p_i x_i^j}{\sum_{i=1}^n p_i} \quad (\text{III.6})$$

égales aux moyennes des caractères.

La matrice symétrique V à p lignes et p colonnes de terme général

$$V_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^n p_k q_k^i q_k^j (x_k^i - g^i) \cdot (x_k^j - g^j)}{\sum_{k=1}^n p_k} \quad (\text{III.7})$$

est appelée matrice d'inertie ou de covariance associée au nuage.

V_{ij} est la covariance des caractères i et j .

V_{ii} est la variance du caractère i ou le carré de l'écart-type σ_i^2 du $i^{\text{ième}}$ caractère.

Dans notre travail, nous affectons d'un poids égal à l'unité tous les individus qui servent aux calculs et d'un poids nul tous les individus qui ne servent pas aux calculs, nous affectons chaque caractère (paramètre de la cascade) d'un poids égal à l'inverse de l'écart-type de façon à donner la même importance à chaque caractère. Avec cette manipulation, nous évitons que les caractères qui ont un grand écart type ne dominent l'analyse.

Par analogie avec la mécanique, nous définissons l'ellipsoïde d'inertie d'un nuage $\mathcal{J}$ par la surface ellipsoïdale dont les grands axes passent par le centre de gravité de $\mathcal{J}$, sont parallèles aux vecteurs propres de la matrice des covariances associée au nuage $\mathcal{J}$, et proportionnels aux valeurs propres correspondantes. L'expérience montre (par analogie avec une distribution gaussienne pour une seule variable) que la majorité des points de $\mathcal{J}$ sont à l'intérieur de cette ellipsoïde.

Par conséquent :

- (a) Si deux populations représentées par des nuages $\mathcal{J}^*$ et $\mathcal{J}^{**}$ ont des ellipsoïdes d'inertie séparées, nous pouvons dire qu'elles sont différentes ;
- (b) Si au contraire, leurs ellipsoïdes d'inertie sont confondues, nous pouvons dire qu'elles sont semblables ;
- (c) Si l'ellipsoïde d'inertie de l'un est à l'intérieur de l'autre, nous pouvons dire que la première population est un sous-groupe de la seconde population ;
- (d) Si un point est à l'intérieur d'une ellipsoïde d'inertie, nous pouvons dire que l'individu qu'il représente appartient à la population correspondant à cette ellipsoïde d'inertie ;
- (e) Si ce point est à l'extérieur, nous émettrons la conclusion inverse.

Quoique n'importe quelle définition de la distance pourrait convenir, les statisticiens ont l'habitude d'utiliser la distance euclidienne pour des raisons de commodité de calcul. Dans notre travail, nous adoptons aussi la distance euclidienne comme critère de "ressemblance" entre deux individus tout en étant conscient du caractère arbitraire d'un tel choix.

L'hyperplan de dimension p^* ($p^* \leq p$) passant par le centre de gravité de $\mathcal{J}$ qui met en évidence les ressemblances ou dissemblances entre les individus de $\mathcal{I}$ est celui qui maximise la somme des carrés des projections sur cet hyperplan des vecteurs représentatifs de $\mathcal{I}$, c'est-à-dire un hyperplan tel que le moment d'inertie de $\mathcal{J}$ par rapport à cet hyperplan soit maximal. On démontre [100] que cet hyperplan est défini par les p^* vecteurs propres correspondant aux p^* plus grandes valeurs

propres de la matrice des covariances associée au nuage $\mathcal{J}$. On démontre aussi que [100] le rapport du moment d'inertie de $\mathcal{J}$ sur l'inertie de $\mathcal{J}$ en son centre de gravité est égal au rapport de la somme des p^* valeurs propres sur la trace de la matrice des covariances. Ce rapport donne la proportion d'informations enregistrées sur cet hyperplan par rapport à l'ensemble des informations.

Tout le travail d'analyse factorielle consiste donc à calculer la matrice des covariances, les valeurs et vecteurs propres de cette matrice, puis de choisir p^* de façon à ce que la proportion d'informations soit suffisante. Quand le nombre de caractères est faible p^* peut être inférieur ou égal à 3.

III - LES MOYENS D'INVESTIGATION.

Nos moyens d'investigation peuvent être regroupés en deux groupes de programmes : les programmes de simulation et les programmes d'analyse des données. Ils sont écrits en langages FORTRAN ou APL. Nous n'en donnons ici la description que des principaux. La figure III-1 indique leur agencement.

3.1 - Les programmes de simulation.

L'étape dynamique peut se diviser en trois stades. Au début, les atomes ont une énergie assez importante pour que l'on puisse considérer les collisions comme des collisions binaires. Ensuite, à mesure que les atomes perdent leur énergie cinétique dans diverses collisions avec les autres atomes ou les électrons du solide, l'approximation des collisions binaires devient de moins en moins valable et il faut tenir compte de l'interaction de plusieurs corps en même temps. Finalement, quand tous les atomes ont perdu toute leur énergie cinétique, il y a une relaxation du cristal pour que l'énergie potentielle totale du cristal atteigne un minimum local. Cette relaxation est à distinguer de l'étape du recuit thermique que nous n'étudions pas dans cette thèse.

Pour simuler ces trois étapes, nous avons utilisé trois programmes :

- le programme de simulation par collisions binaires,
- le programme de simulation par interactions multiples,
- le programme de relaxation des atomes.

3.1.1 - Programme de simulation par collisions binaires.

Ce programme porte le nom de code MARLOWE. Il est mis au point par ROBINSON et TORRENS [40, 41, 45], qui l'ont déjà décrit dans plusieurs publications [40, 41, 45] et nous n'en rappelons ici que les grandes lignes.

Au point de vue de la physique, il est fondé sur le mécanisme de collisions binaires avec des possibilités de collisions simultanées avec un petit nombre de particules et il tient compte des pertes par collisions inélastiques et de la vibration atomique des atomes.

Au point de vue de la programmation, MARLOWE crée le cristal au fur et à mesure du développement de la cascade, ce qui permet d'augmenter la taille de la cascade de collisions sans introduire des zones inutiles de mémoire d'ordinateur. De plus, il est écrit de façon à pouvoir changer facilement les modèles (a) de potentiel interatomique, (b) de collision inélastique et (c) de vibration thermique.

3.1.2 - Programme de simulation par interactions multiples.

Ce programme porte le nom de code ANGIANG. Il est basé sur le même principe que celui mis au point par le groupe de BROOKHAVEN, mais avec les différences suivantes :

- au point de vue des mathématiques, nous avons utilisé un outil mathématique plus puissant,
- au point de vue de la physique, nous avons tenu compte de toutes les particularités physiques prises en compte par MARLOWE, à savoir la perte par collisions inélastiques et la vibration thermique des atomes,
- au point de vue de la programmation, ANGIANG permet les mêmes facilités que MARLOWE pour changer les modèles de potentiel interatomique, de collisions inélastiques et de vibrations thermiques, il crée aussi le cristal au fur et à mesure du développement de la cascade.

3.1.3 - Programme de relaxation des atomes.

Ce programme porte le nom de code DAGIANG. Il est le même que celui qui nous a permis de calculer les énergies des défauts avec cette différence que, dans ce travail, nous nous intéressons aux positions finales des atomes.

Nous rappelons au chapitre IV le principe de notre calcul par interactions multiples.

A l'origine, nous pensions pouvoir procéder de la façon suivante : utiliser successivement MARLOWE, ANGIANG puis DAGIANG. Nous commençons la création de la cascade avec MARLOWE en arrêtant les atomes à une énergie assez basse, disons une centaine d'électron-volts. Nous figeons le cristal et nous continuons la création de la cascade avec ANGIANG jusqu'à ce que chaque atome n'ait plus qu'une énergie cinétique du même ordre de grandeur que l'énergie de migration des défauts. Nous figeons à nouveau le cristal et, avec DAGIANG, nous pouvons connaître les positions finales de chaque atome, à la fin de l'étape dynamique. Malheureusement, cette procédure est irréalisable dans l'état actuel de la technologie : elle demande un temps de calcul trop élevé, même avec les plus gros ordinateurs dont nous disposons. Nous avons donc dû restreindre notre ambition à les utiliser séparément en essayant de tirer le maximum d'informations de cette utilisation.

3.2 - Les programmes d'analyse des données.

Nous avons mis au point trois importants programmes : deux programmes de visualisation des cascades et celui d'analyse factorielle des données. Ces trois programmes nous ont été très utiles, surtout dans la caractérisation des cascades de focalisation et des cascades de canalisation. Ils ne sont utilisables qu'avec le matériel de la Compagnie Internationale des Services Informatiques. Les autres analyses statistiques des résultats sont menées avec des outils moins sophistiqués : boulier, règle à calcul, petits programmes d'ordinateur, ...

3.2.1 - Programme de visualisation des cascades.

Dès le début de notre étude, nous avons cherché à étudier la forme de la cascade et les dispositions des défauts. Il nous fallait une méthode pratique qui nous permette d'observer sous tous les angles un objet à trois dimensions. Pour répondre à ce problème, nous avons conçu deux programmes baptisés MAIANH et SUZANNA.

Le programme MAIANH permet de visualiser sur un écran IBM-2250 les défauts et amas de défauts dans une cascade. Il est basé sur le principe de la perspective isométrique. On peut indifféremment orienter le cristal, le déplacer ou agrandir l'image à volonté. Ainsi on peut avoir une image de toute ou partie de la cascade, vue sous tous les angles.

Le programme SUZANNA réorganise les données créées par ANGIANG. Ces données sont enregistrées sur bande magnétique et concernent les trajectoires et les évolutions au cours du temps des énergies cinétiques des atomes du cristal pendant la création de la cascade. Après réorganisation, le programme commande le tracé graphique de ces trajectoires suivant un angle de vue qu'on peut choisir librement. Divers calculs statistiques peuvent être jumelés à ce programme.

3.2.2 - Programme d'analyse factorielle.

Comme nous l'avons dit au paragraphe précédent, l'analyse factorielle des données pourrait nous donner de nombreuses indications sur les études théoriques que nous pouvons mener. Aussi, nous avons conçu un programme appelé AMELIA qui visualise sur traceur BENSON les résultats d'analyses en composantes principales. Avec ce programme nous pouvons éventuellement faire une analyse discriminante ou bien une analyse des correspondances.

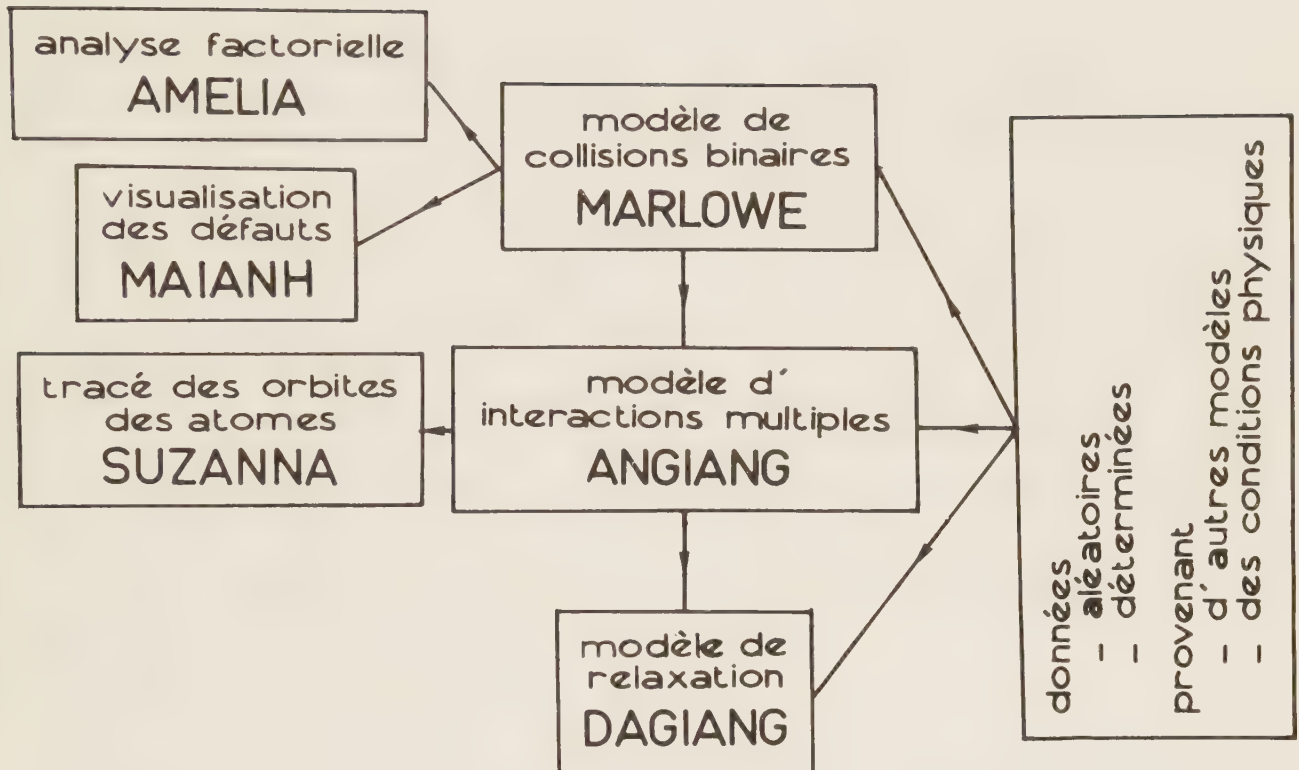


Figure III-1

Agencement des principaux programmes de ce travail

Chapitre IV

SIMULATIONS NUMERIQUES AVEC LE MODELE D'INTERACTIONS MULTIPLES

Nous aurions pu commencer par le modèle de collisions binaires. Mais à la fin de son parcours, tout atome énergétique a une énergie tellement faible que le modèle de collisions binaires n'est plus valable. Il faut donc étudier d'abord l'action d'un atome à faible énergie sur le solide pour savoir à partir de quand on peut ne plus tenir compte de cet atome, notamment pour se donner une valeur raisonnable de l'énergie de coupure et celle de l'énergie seuil de déplacements.

Dans ce chapitre, nous exposons les principes des modèles d'interactions multiples (paragraphe I) dont nous comparons les résultats avec ceux de JOHNSON [101] et de GIBSON et col. [28]. Nous étudions ensuite le parcours d'un atome dans un solide quand il a une faible énergie (paragraphe II). Cette étude nous conduit à discuter de l'existence de la focalisation quand il y a vibration thermique et d'une valeur de l'énergie de coupure. La vérification du modèle de collisions simultanées introduit dans le modèle MARLOWE sera faite en étudiant les échanges d'énergie en focalisation (paragraphe III). L'étude de la création des défauts (paragraphe IV) nous permet de douter de l'existence d'une pointe thermique et de discuter de la signification de l'énergie seuil de déplacements.

I - PRINCIPE DU MODELE D'INTERACTIONS MULTIPLES.

Le problème de la collision entre deux corps isolés dans l'espace est assez aisé à résoudre. Mais, quand le nombre de corps en interaction dépasse trois, il devient moins aisé de résoudre le problème. Quand le nombre de corps est très grand, on peut essayer de résoudre le problème par la mécanique statistique. Quand le nombre de corps est petit, on peut utiliser un ordinateur pour résoudre le problème, mais, même avec les ordinateurs les plus puissants, on est vite limité.

Après avoir exposé le principe des modèles d'interactions multiples (paragraphe 1.1) nous décrivons nos modèles de calcul des énergies de défauts (paragraphe 1.2) et de création des défauts aux faibles énergies (paragraphe 1.3), modèles que nous comparons à ceux de JOHNSON [101] et de GIBSON et col. [28].

1.1 - Résolution du problème à plusieurs corps en mécanique newtonienne.

Soit un système isolé de N corps en interaction. Chaque corps i est caractérisé par :

- son vecteur-position $\vec{x}_i = (x_i^1, x_i^2, x_i^3)$
- son vecteur-vitesse $\vec{v}_i = (v_i^1, v_i^2, v_i^3)$

- sa masse m_i

On note :

$\vec{f}_i$, la résultante des forces exercées sur le corps

$\vec{\gamma}_i = (\gamma_i^1, \gamma_i^2, \gamma_i^3) = \frac{\vec{f}_i}{m_i}$, le vecteur accélération du corps

$\vec{x} = \{ \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N \}$, l'ensemble des vecteurs-positions du système

$\vec{v} = \{ \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N \}$, l'ensemble des vecteurs-vitesses du système

$U(\vec{x})$, l'énergie potentielle du système

E , l'énergie totale du système

t , le temps.

L'énergie E reste constante puisque le système est isolé. L'état du système peut être décrit connaissant $(\vec{x}, \vec{v})$ produit cartésien des deux ensembles $\vec{x}$ et $\vec{v}$.

On appelle problème à N corps, le problème posé par la description des mouvements de chaque corps du système en présence des $N-1$ autres connaissant un certain nombre de conditions aux limites ou bien la description des états d'équilibre du système.

En supposant la validité de la mécanique classique et en supposant que les particules sont discernables, la résolution du problème à N corps revient à résoudre $3N$ équations différentielles vectorielles de la forme

$$\frac{d^2 x_i^j}{dt^2} = \frac{1}{m_i} f_i^j \quad (j = 1, 2, 3 ; i = 1, 2, \dots, N) \quad (\text{IV.1})$$

avec les conditions aux limites du problème. Ces équations proviennent des lois de la mécanique galiléenne. Elles peuvent se décomposer en un système de $6N$ équations différentielles de la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dv_i^j}{dt} = \frac{1}{m_i} f_i^j \\ \frac{dx_i^j}{dt} = v_i^j \end{array} \right. \quad (j = 1, 2, 3 ; i = 1, 2, \dots, N) \quad (\text{IV.2})$$

1.2 - Calcul des énergies de défauts.

1.2.1 - Méthode de résolution numérique.

Calculer les énergies ou les configurations des défauts est un problème de description des états d'équilibre d'un système à plusieurs corps. Cela revient à résoudre le programme mathématique

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Min } U(\vec{x}) = \frac{1}{2} \sum_i U_i(\vec{x}) \\ \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \frac{1}{m_i} \vec{f}_i(\vec{x}) = \vec{\gamma}_i \\ \frac{d\vec{x}_i}{dt} = \vec{v}_i \end{array} \right. \quad (\text{IV.3})$$

$i = 1, 2, \dots, N$

$U_i(\vec{x})$ = énergie potentielle du $i^{\text{ème}}$ atome en présence des $N-1$ autres atomes.

La résolution de ce programme est assez fastidieuse pour peu que les potentiels interatomiques aient des formes analytiques compliquées ou que N ait une valeur très élevée.

Il existe plusieurs méthodes de résolution de ce problème d'optimisation [102, 103]. Les plus connues sont :

- méthode de NEWTON ;
- méthode des vecteurs conjugués ;
- méthode du gradient.

Les deux premières demandent une grande taille de mémoire à l'ordinateur et s'adaptent donc mal à notre problème où N est très grand. La méthode du gradient serait valable si elle n'était pas trop lente.

DAHL et col. [104] ont mis au point une méthode de calcul plus proche de la réalité physique : les atomes dans l'état $(\vec{x}, \vec{v})$ qui n'est pas l'état d'équilibre sont soumis à une accélération $\vec{\alpha}$ qui tend à faire diminuer l'énergie potentielle. Donc, entre les instants t et $t + \Delta t$, le vecteur-vitesse varie de $\vec{v}(t)$ à $\vec{v}(t + \Delta t)$ et le vecteur-position varie de $\vec{x}(t)$ à $\vec{x}(t + \Delta t)$. En supposant que $\vec{v}(t)$ et $\vec{x}(t)$ aient des dérivées premières et que ces dérivées soient continues au voisinage de t - ce qui est possible si on ne donne pas de modèle de potentiel trop compliqué et si on ne laisse pas les atomes s'approcher trop - on peut développer $\vec{v}(t + \Delta t)$ et $\vec{x}(t + \Delta t)$ jusqu'au premier ordre près autour de t :

$$\begin{aligned}\vec{v}(t + \Delta t) &= \vec{v}(t) + \vec{\alpha} \Delta t \\ \vec{x}(t + \Delta t) &= \vec{x}(t) + \vec{v} \Delta t\end{aligned}\tag{IV.4}$$

Au fur et à mesure que l'énergie potentielle diminue, l'énergie cinétique du système augmente. Pour trouver le vecteur-position d'équilibre $\vec{x}_e$, il suffit d'annuler le vecteur-vitesse $\vec{v}$ quand l'énergie cinétique du système atteint un maximum et recommencer l'itération.

Cette méthode est rapidement convergente, mais elle peut encore être améliorée. En effet, elle autorise quand même des oscillations individuelles des atomes : une petite diminution de l'énergie cinétique d'un atome (ce qui veut dire que cet atome a dépassé son nouveau point d'équilibre) peut être largement compensée par l'augmentation de l'énergie cinétique totale de tous les autres et passer ainsi inaperçue.

Nous avons amélioré cette méthode dans notre modèle DAGIANG en annulant l'énergie cinétique de chaque atome dès que celle-ci a atteint son maximum. L'énergie cinétique d'un atome i a atteint son maximum quand celui-ci a dépassé son point d'équilibre, c'est-à-dire quand sa vitesse n'a pas le même sens que son accélération, en d'autres termes, quand $v_i^j \alpha_i^j$ ($j = 1, 2, 3$; $i = 1, 2, \dots, N$) est devenu négatif. A chaque itération, nous faisons le test sur le signe de $v_i^j \alpha_i^j$. Si ce produit est négatif, nous faisons annuler la composante correspondante de la vitesse. Avec cette méthode, nous réduisons au maximum le nombre d'oscillations. Le nombre d'itérations est réduit d'une façon assez importante pour rentabiliser les tests supplémentaires. Nous avons fait la comparaison avec la méthode de DAHL et col.

[104] et nous avons trouvé un temps de calcul au moins deux fois moindre.

1.2.2 - Modèle du cristal.

En 1938 MOTT et LITTLETON [105] proposèrent pour des solides ioniques un modèle de cristal comprenant deux régions :

- une région I, dans le voisinage immédiat des défauts, où chaque atome est considéré comme une particule discrète libre de se déplacer dans le champ des forces créées par les autres atomes ;

- une région II où le solide est supposé être un continuum élastique.

TEWORDT [106] en 1958 modifia pour le cuivre ce modèle en introduisant entre les régions I et II une région III frontière, dans laquelle les atomes sont encore considérés comme des particules discrètes, mais où l'élasticité linéaire s'applique.

En 1965 COTTERILL et DOYAMA [107] modifièrent pour les métaux c.f.c. le modèle de MOTT et LITTLETON en remplaçant dans la région II le continuum élastique par des atomes discrets et immobiles quitte à prendre une région I suffisamment grande. Ce modèle, considéré comme le plus pratique, sera celui adopté pour ce travail.

La figure IV-1 montre les différences entre les trois modèles.

Comme les potentiels ont une portée limitée, on peut ne pas tenir compte de ceux des atomes de la région II qui sont distants des atomes de la région I d'une distance supérieure à la portée du potentiel. Ceci permet de réduire la taille de mémoire des programmes. Les atomes de la région I sont dans la réunion des sphères de même rayon centrées sur les défauts. Ainsi on peut ne tenir compte que des atomes relaxant le plus et augmenter l'efficacité du programme. La figure IV-2 donne un exemple de configuration cristalline autour d'une trillacune dans un réseau carré.

Pour avoir beaucoup de précision sur les résultats, on a intérêt à prendre un cristal très grand. Mais le temps de calcul d'une itération augmente comme la factorielle du nombre d'atomes dans le cristal. On est donc obligé de choisir une taille de cristal suffisamment grande pour que les calculs soient précis et suffisamment petite pour qu'ils ne durent pas trop longtemps.

Pour profiter au maximum du fait que le temps de calcul d'une itération est faible pour un petit cristal on ne crée au début que quelques couches d'atomes autour des défauts. Quand les atomes ont suffisamment relaxé, on agrandit le cristal et on continue la relaxation avec le cristal ainsi agrandi. On agrandit ainsi le cristal jusqu'à ce qu'on le juge suffisamment grand pour supposer que les atomes de la région II relaxent d'une façon négligeable. On continue alors la relaxation sans agrandir le cristal. On arrête les calculs quand l'énergie de relaxation ne varie plus que d'une façon négligeable.

Les atomes se placent exactement à leur position d'équilibre, dans une configuration de défaut donnée, quand leur nombre tend vers l'infini. Dans ce cas l'énergie potentielle calculée sera exactement minimale. Dès que, au moins, un atome ne se trouve pas exactement à sa position d'équilibre, l'énergie potentielle n'est plus minimale. Comme le nombre d'atomes pris en compte dans le calcul est limité, leur position d'équilibre calculée n'est pas exactement leur vraie position d'équilibre, donc l'énergie potentielle calculée est une majoration de la vraie énergie potentielle.

1.3 - Description des parcours des atomes énergiques.

1.3.1 - Méthode de résolution numérique.

Décrire les parcours des atomes énergiques du solide c'est déterminer les positions respectives de ces atomes au cours du temps. Ce problème revient à résoudre pas à pas le système d'équations avec comme contrainte, l'état initial ($\vec{x}_0, \vec{v}_0$) du système.

Quatre méthodes d'intégration ont été proposées pour résoudre le système d'équations :

- la méthode des différences centrales utilisées par le groupe de BROOKHAVEN [24-26, 28, 47], par HARRISON et col. [27, 29-31] et par TORRENS et CHADDERTON [44],
- la méthode d'EULER-CAUCHY basée sur les développements en séries de TAYLORS des vecteurs $\vec{x}$ et $\vec{v}$ jusqu'à un ordre compatible avec la précision que l'on désire,
- la méthode dite du "prédicteur-correcteur", utilisée par RAHMAN et STILLINGER [108-109] dans leurs calculs sur la dynamique moléculaire des liquides,
- la méthode de NEWTON-COTES utilisée par NORDSIECK [110].

La méthode des différences centrales et celle d'EULER-CAUCHY quand elle est limitée aux trois premiers termes du développement du vecteur $\vec{x}$ et aux deux premiers termes du développement du vecteur $\vec{v}$ sont les deux méthodes qui rappellent le mieux la mécanique classique. La méthode d'EULER-CAUCHY est la seule qui ne soit pas à pas liés. La méthode de NEWTON-COTES est celle qui s'adapte le mieux à l'utilisation d'un ordinateur si elle ne demande pas une très grosse taille de mémoire à l'ordinateur.

Nous pensons que puisqu'il y a résolution numérique d'un système d'équations différentielles de la forme canonique

$$\ddot{\vec{y}} = \phi(\vec{y}) \quad (\text{IV.5})$$

avec

$$\ddot{\vec{y}} = \frac{d^2 \vec{y}}{dt^2} \quad (\text{IV.6})$$

il n'y a aucune raison d'essayer de trouver une quelconque analogie avec la physique. La meilleure méthode de résolution devrait demander le moins de taille mémoire possible, d'une précision suffisante et à pas libre. En effet, il est nécessaire de réduire le coût des calculs et les programmes qui demandent le moins de mémoire à l'ordinateur sont les moins coûteux. Les méthodes à pas libres permettent d'augmenter ou de diminuer le pas de l'itération afin d'optimiser la vitesse de l'itération et la précision demandée. La méthode que nous trouvons la mieux adaptée à ces exigences est celle de RUNGE-KUTTA d'ordre deux. Elle est mise en oeuvre pour le problème qui nous intéresse grâce aux formules suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{x}^{(*)} = \vec{x}(t) + \frac{\Delta t}{2} \vec{v}(t) + \frac{\Delta t^2}{8} \vec{\sigma}(t) \\ \vec{\sigma}^{(*)} = \vec{F}(\vec{x}^{(*)}) \\ \vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \Delta t \vec{v}(t) + \frac{\Delta t^2}{6} [\vec{\sigma}(t) + 2 \vec{\sigma}^{(*)}] \\ \vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \Delta t \vec{\sigma}^{(*)} \end{array} \right. \quad (\text{IV.7})$$

Cette méthode donne une précision en Δt^4 sur $\vec{x}$ et en Δt^3 sur $\vec{v}$. Elle est d'un or-

dre moins précis que celle utilisée par NORDSIECK [110], mais elle demande deux fois moins de mémoire à l'ordinateur et elle permet de changer très rapidement le pas de l'itération.

1.3.2 - Modèle du cristal.

En 1960, le groupe de BROOKHAVEN [28] proposa un cristallite comprenant des atomes répartis suivant la structure cristalline étudiée, interagissant par des potentiels interatomiques isotropes. La cohésion du cristallite se simule par l'application sur les atomes de la surface d'une force proportionnelle au déplacement. Ce modèle est adopté par la plupart des auteurs.

Si nous voulons créer le cristal au fur et à mesure du développement de la cascade, nous ne pouvons pas choisir ce modèle trop contraignant. Nous supposons le solide composé de trois zones (figure IV-3) :

- la zone I qui contient tous les atomes qui ont reçu une énergie importante de l'ordre de l'électron-volt, au cours de la création de la cascade,

- la zone II qui contient des atomes qui ne sont pas distants des atomes de la zone I d'une distance trop importante, disons une unité de paramètre, dans laquelle les atomes sont supposés ne pas avoir reçu d'énergie importante mais assez proches des atomes de la zone I pour avoir un déplacement appréciable,

- la zone III qui contient tous les autres atomes situés au-delà de la zone II et qui sont assez éloignés de la zone I pour être considérés comme immobiles et n'intervenir que pour créer le champ de force dans lequel évoluent les atomes des zones I et II.

Comme on peut le constater, le modèle de cristal est le même que celui que nous préconisons pour le modèle de calcul des défauts. Au début, la zone I se réduit au premier atome frappé. A mesure que les atomes de la zone II reçoivent de l'énergie cinétique, ils passent à la zone I et, par voie de conséquence, font passer à la zone II un certain nombre d'atomes de la zone III. On agrandit ainsi peu à peu le cristal à mesure que la zone endommagée s'étend. Cette méthode permet de profiter de la petite taille du cristal au début du calcul pour accélérer les itérations et de faire une économie de mémoire d'ordinateur en n'introduisant que les coordonnées des atomes dont on a vraiment besoin. La figure IV-3 donne une idée de l'évolution de la taille du cristallite que nous utilisons.

Quand tous les atomes de la zone I ont une énergie cinétique assez faible (4 à 5 eV pour fixer les idées) on augmente le pas de l'itération et on arrête le calcul quand, au bout d'une vingtaine d'itérations, aucun atome de la zone I n'a une énergie cinétique supérieure à une énergie de migration d'un interstitiel (de l'ordre de l'électron-volt) pendant une vingtaine d'itérations.

1.3.3 - Modèle de frottements électroniques et de vibration thermique.

Pour tenir compte du frottement électronique, après chaque itération nous retranchons à chaque atome mobile une énergie cinétique qui correspond à la vitesse et au déplacement de cet atome pendant cette itération. Les modèles de frottement électronique utilisés sont ceux de LINDHARD et de FIRSOV [54, 57]. La différence avec le modèle MARLOWE est la suivante : dans MARLOWE, la perte par collision inélastique est retranchée avant la collision alors que, dans ANGLANG elle est retranchée après l'itération. Cette différence ne fait que faciliter le calcul et la programmation du modèle, car, au point de vue de la physique, étant donnée la faiblesse

des vitesses des atomes, faiblesse qui nécessite l'utilisation d'un modèle à interactions multiples, les pertes par collisions inélastiques sont tellement faibles que la différence de méthode de calcul est négligeable. D'ailleurs dans une série de simulations préliminaires, nous avons constaté que, pour des premiers atomes frappés d'énergie inférieure à 250 eV, les deux modèles de frottements électroniques utilisés nous donnent une perte d'énergie par frottement électroniques inférieure à quelques pour cent de l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé. Nous pouvons donc dans la suite de notre travail négliger les effets de ce frottement.

Pour tenir compte de la vibration thermique, nous avons supposé les atomes déplacés de leur site d'équilibre d'un déplacement distribué aléatoirement d'une façon gaussienne et parallèlement aux trois axes qui servent de repère au cristal. La moyenne $\bar{u}$ des déplacements est égale à l'amplitude de vibration calculée avec le modèle de DEBYE [111, 112]

$$\bar{u} = \frac{1}{\omega} \left(\frac{E_{\text{vib}}}{m} \right)^{1/2} \quad (\text{IV.8})$$

avec

$$\bar{\omega} = \frac{3}{4} \frac{k_B \Theta_D}{h} \quad (\text{IV.9})$$

$$E_{\text{vib}} = 9 k_V T \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad (\text{IV.10})$$

k_B = constante de BOLTZMANN

h = constante de PLANCK

Θ_D = température de DEBYE

T = température du cristal

m = masse de l'atome

$\bar{\omega}$ = moyenne de la fréquence de vibration atomique

E_{vib} = énergie de vibration atomique

Nous avons à nouveau une petite différence avec le modèle MARLOWE. Dans le modèle MARLOWE, on suppose que la cible est déplacée, avant chaque collision, de sa position d'équilibre d'une façon aléatoire. La direction du déplacement est perpendiculaire à la direction de la vitesse du projectile. Ces déplacements sont répartis suivant une gaussienne d'écart-type égal à l'amplitude de vibration de l'atome cible. Nous pensons que cette différence n'a pas grande influence sur la physique du modèle.

Etant donnée la courte durée de création d'une cascade par rapport à la période de vibration d'un atome (de l'ordre de 10^{-14} sec contre 10^{-12} sec environ), nous avons supposé que les atomes soient déplacés de leur site d'équilibre avant la création de la cascade et restent au même point jusqu'à ce qu'il y ait interaction avec un ou plusieurs autres atomes. Nous aurions dû tenir compte de la corrélation des vibrations atomiques de la façon suivante : nous simulons un état initial des positions des atomes du réseau comme nous l'avons décrit plus haut puis nous faisons interagir les atomes assez longtemps pour que l'état permanent soit atteint, les atomes vibrant alors de façon corrélée. Mais cette méthode est trop coûteuse en temps de calcul et, à haute température, une telle précision n'a plus de sens devant

toutes les approximations que nous avons cumulées dans notre modèle.

1.4 - Essais préliminaires des modèles.

Nous avons dit au paragraphe 1.3.3 que nous avons fait un essai préliminaire qui nous a permis de négliger dans nos calculs l'influence des frottements électroniques. Dans ce paragraphe, nous faisons la comparaison de nos modèles DAGIANG et ANGIANG avec ceux de nos prédécesseurs (paragraphe 1.4.1), puis nous examinons l'influence des paramètres qui commandent la précision du calcul (paragraphe 1.4.2), du modèle de potentiel interatomique (paragraphe 1.4.3) et de la vibration thermique (paragraphe 1.4.4). Les résultats que nous avons obtenus avec notre modèle DAGIANG sont déjà publiés [114], nous ne les rappelons ici que pour mémoire.

1.4.1 - Comparaison avec les modèles antérieurs.

Nous avons refait les mêmes calculs d'énergies de défauts réalisés par JOHNSON [101] avec les mêmes modèles de potentiel que celui-ci propose pour le fer-alpha et le vanadium (cf. Annexe I). La figure IV.4 montre quelques-unes des configurations que nous avons étudiées. Les tableaux IV.1 à IV.3 montrent que nos résultats ne sont pas très différents de ceux de JOHNSON, ce qui nous permet d'affirmer que notre modèle DAGIANG n'est pas très différent de celui qu'il a proposé.

Nous avons aussi refait les mêmes simulations de créations des cascades de GIBSON et col. [28] : un atome dans un cristal de cuivre cubique à faces centrées quitte son site de réseau dans le plan (100) en faisant avec la direction $\langle 100 \rangle$ un angle de $22^\circ 1/2$ ou 15° (Figures IV-5) après avoir reçu une énergie cinétique de 40 eV ; le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB 2 (cf Annexe I) ; le réseau est supposé statique.

GIBSON et col. [28] ont trouvé des rangées de collisions dans les directions $\langle 110 \rangle$, $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ et $\langle 100 \rangle$ et qu'il y a création d'une paire de FRENKEL après une succession de remplacements atomiques (Figures IV-5). Avec notre modèle, nous voyons que, qualitativement, nous avons les mêmes rangées privilégiées où les collisions se succèdent (Figures IV-7 à IV-8). Mais ce sont les seules ressemblances parce que nous n'avons pas les mêmes formes de parcours atomiques, ni les mêmes créations de paires de FRENKEL.

1.4.2 - Précision du calcul.

Nous pensons que notre désaccord avec les résultats de GIBSON et col. [28] provient principalement des paramètres qui commandent la précision du calcul.

Avec notre méthode d'itération, la précision est en Δt^3 sur la vitesse et en Δt^6 sur l'énergie cinétique. Plus nous diminuons Δt , plus grande sera la précision. Nous avons pris $\Delta t = 10^{-15}$ seconde au début de la simulation et 5×10^{-15} seconde quand tous les atomes ont des énergies cinétiques inférieures à 2 eV. Ces pas sont systématiquement plus petits que ceux utilisés par GIBSON et col. [28]. Nous pensons qu'avec une telle précision nous n'avons pas besoin de renormaliser les vitesses pendant le calcul afin d'assurer la loi de conservation de l'énergie.

Un autre paramètre qui commande la précision du calcul est la taille du cristallite utilisé dans la simulation. Nous avons trouvé que au delà de trois couches (c'est-à-dire 19 atomes) d'atomes mobiles entourant des atomes dont l'énergie est supérieure à un électron-volt (que nous appelons atomes énergiques) les résultats ne changent pas beaucoup. Nous prendrons donc dans l'avenir trois couches

d'atomes mobiles autour de chaque atome énergiques. Par contre, si nous augmentons le nombre d'atomes fixes qui entourent les atomes mobiles, nous constatons que les collisions sont plus focalisées (Figures IV-6-c et IV-6-d) : les atomes qui ne sont pas sur les quelques grandes rangées de collisions ne reçoivent pas d'énergies importantes. Il y a donc augmentation du pouvoir focalisant du réseau. Dans l'avenir, nous prendrons cinq couches (87 atomes) d'atomes fixes autour des atomes mobiles. Nous pensons, sans pouvoir le justifier, que ce nombre est suffisant pour les recherches que nous menons sans ruiner notre budget temps d'ordinateur.

1.4.3 - Influence du modèle de potentiel interatomique.

Nous avons de nouveau refait les simulations que nous avons décrites au paragraphe 1.4.1, mais avec le modèle de potentiel MOL 1 (cf. Annexe I). Nous avons trouvé d'énormes différences dans les parcours atomiques (Figures IV-7). Par exemple, nous avons trouvé deux grandes rangées de collisions avec un premier atome frappé qui a une impulsion faisant un angle de $22^{\circ} 1/2$ avec la direction $\langle 100 \rangle$ (Figure IV-7-a) au lieu de cinq (Figure IV-7-b) au lieu de trois chaînes de remplacements atomiques (Figures IV-6-b et IV-6-d). Nous avons constaté aussi que les atomes des deux plans voisins au plan des principales collisions peuvent aussi recevoir une énergie importante. Nous pensons que cette différence tient au fait que le modèle MOL 1 a un rayon d'écrantage plus grand donc le potentiel est plus "mou" que le modèle GIB 2. C'est d'ailleurs pour cela que nous avons utilisé le modèle MOL 1 et non le modèle MOL 2 qui est ajusté sur le modèle GIB 2 (cf. Annexe I).

Nous en concluons donc que le modèle de potentiel influe d'une façon importante sur les résultats de la simulation.

1.4.4 - Influence de la vibration thermique.

Nous avons refait les simulations décrites aux paragraphes 1.4.1 et 1.4.3 mais avec un réseau vibrant à la température de 15 K. Nous avons constaté un raccourcissement des chaînes de collisions. Ceci s'explique aisément : avec un réseau qui vibre, la focalisation n'est plus aussi aisée qu'avec un réseau supposé statique et il peut y avoir une défocalisation comme nous l'avons indiqué au chapitre V (figures IV-8).

Nous n'avons pas refait les mêmes simulations avec un réseau qui vibre à une température supérieure pour des raisons de cohésion des modèles de vibration thermique et de potentiel interatomique. En effet, le modèle de vibration thermique que nous avons utilisé, celui de DEBYE, nous donne une amplitude de vibration qui risque de donner aux atomes un gain d'énergie potentielle qui, étant donné nos modèles de potentiel interatomique, risque d'être très grande par rapport à l'énergie de vibration thermique, ce qui est contradictoire.

II - PARCOURS DES ATOMES.

Le modèle MARLOWE fait intervenir deux énergies limites : l'énergie seuil de déplacements définie par SEITZ [113] et l'énergie de coupure qui est l'énergie limite en dessous de laquelle un atome est considéré comme arrêté. Nous discutons dans ce paragraphe du choix de l'énergie de coupure à partir de la simulation des parcours atomiques aux faibles énergies. Au paragraphe 4.3, nous discuterons du choix de l'énergie seuil de déplacements.

2.1 - Parcours linéaire et distance parcourue.

2.1.1 - Le problème du choix de l'énergie de coupure du projectile pour le modèle de collisions binaires.

Soit E_0 l'énergie initiale d'un projectile. Nous savons que, par définition, le parcours linéaire de ce projectile est

$$R_\ell = \int_0^{E_0} \frac{dE}{dE/dx} \quad (\text{IV.11})$$

Prendre une énergie de coupure E_c revient à arrêter le projectile avant qu'il n'ait terminé sa course, c'est-à-dire calculer la quantité

$$R'_\ell = \int_{E_c}^{E_0} \frac{dE}{dE/dx} \quad (\text{IV.12})$$

au lieu de R_ℓ . Le problème du choix de l'énergie de coupure consiste à choisir E_c de telle façon qu'on puisse négliger la différence de longueur

$$\Delta R_\ell = R_\ell - R'_\ell \quad (\text{IV.13})$$

devant la longueur exacte R_ℓ . Nous devons donc choisir E_c telle que

$$\Delta R_\ell = \int_0^{E_c} \frac{dE}{dE/dx} \ll \int_0^{E_0} \frac{dE}{dE/dx} \quad (\text{IV.14})$$

Pour cela il nous suffit de calculer ΔR_ℓ pour des énergies E_c inférieures à quelques centaines d'électron-volts et de choisir l'énergie E_c de telle façon que

$$\Delta R_\ell \ll R'_\ell \quad (\text{IV.15})$$

où R'_ℓ est calculé avec le modèle MARLOWE.

2.1.2 - Réalisation de la simulation d'un parcours d'atomes du solide.

Il est évident que E_c est faible et qu'il faut utiliser le modèle ANGIANG. Nous pouvons simuler des parcours de premiers atomes frappés quittant leur site dans des directions choisies aléatoirement par rapport au réseau cristallin et avec des énergies cinétiques croissant par petits intervalles de zéro à une centaine d'électron-volts. Mais cette méthode a deux inconvénients :

- elle risque de nous faire faire un très grand nombre de simulations si l'énergie E_c à choisir est grande,
- elle n'inclue pas les parcours dans le processus exact de création de la cascade car dans la réalité l'atome quitte son site au milieu d'autres atomes en train de quitter les leurs, ce qui n'est évidemment pas le cas avec notre méthode de simulation.

Une meilleure méthode de simulation consiste à faire partir un premier atome frappé dans une direction choisie aléatoirement et avec une énergie cinétique de quelques centaines d'électron-volts et d'étudier les déplacements des atomes en fonction de l'énergie cinétique qu'ils ont reçue. Outre l'avantage d'un meilleur

réalisme, nous avons une bonne répartition des énergies cinétiques reçues et des vitesses initiales des atomes de faibles énergies de la cascade. Nous pouvons donc faire une étude statistique sur la répartition des énergies cinétiques reçues et des parcours atomiques dans une pointe de déplacement.

Dans le modèle d'interactions multiples, la détermination de l'orientation de la vitesse initiale d'un atome énergétique autre que le premier atome frappé est très compliqué. Il nous est donc impossible de calculer la pénétration et le déplacement latéral d'un atome autre que le premier atome frappé. Par contre, nous pouvons calculer le parcours linéaire en intégrant la distance parcourue par l'atome à chaque itération et la distance parcourue en calculant la distance entre la position finale et la position initiale de l'atome. Cette restriction ne nous gêne pas puisque la pénétration et le déplacement latéral sont limités supérieurement par la distance parcourue et par le parcours linéaire. Il nous suffit donc de connaître la limite supérieure de ΔR_ℓ .

2.1.3 - Analyse des résultats des simulations.

Nous avons fait des simulations avec le cuivre et le fer. L'énergie cinétique initiale du premier atome frappé est de 100 eV. L'étude statistique montre que en dessous de 10 eV très peu d'atomes ont parcouru une distance supérieure à la demi-distance interatomique, même si parfois quelques-uns ont un parcours linéaire important. Les atomes qui ont reçu une énergie cinétique inférieure à 50 eV ne peuvent pas parcourir une distance supérieure à deux unités de réseau. Comme les parcours des atomes ayant une énergie cinétique de quelques dizaines de kilo-électron-volts se calculent par centaines d'unités de réseau, nous pouvons choisir une énergie de coupure raisonnable qui ne sera pas supérieure à une cinquantaine d'électron-volts quand nous étudions le parcours des atomes.

Nous avons étudié le parcours linéaire des atomes en fonction de l'énergie cinétique qu'ils ont reçue. Nous avons trouvé que le parcours linéaire est proportionnel à la racine carrée de l'énergie (figure IV-9-a). Nous discuterons plus en détail sur ce résultat au chapitre V (paragraphe 2.1.2). Nous pensions que, par conséquent, la distance parcourue peut aussi se déduire de l'énergie cinétique reçue par une relation analogue. Or il n'en est rien (figure IV-9-b). Nous pensons que ce manque de corrélation est dû au fait que les atomes, pour la plupart, se contentent de vibrer autour de leur site d'équilibre parce qu'ils ont reçu une énergie trop faible pour pouvoir se déplacer sur une distance importante. Notre hypothèse est confirmée quand nous étudions la distance parcourue en fonction du parcours linéaire. Nous trouvons que la distance parcourue est très faible par rapport au parcours linéaire et n'est pas corrélée linéairement avec le parcours linéaire comme l'on pouvait s'y attendre avec la théorie de LINDHARD et SCHARFF [55].

Nous sommes donc arrivé à deux conclusions pour les parcours d'atomes aux faibles énergies :

- (a) le parcours linéaire est proportionnel à la racine carrée de l'énergie cinétique,
- (b) mais la plupart des atomes ne font que vibrer autour de leur site d'équilibre.

2.2 - La focalisation et la canalisation.

La focalisation est un phénomène des faibles énergies. Son étude implique donc la mise en oeuvre du modèle d'interactions multiples. La canalisation, qui subsiste aux grandes énergies, risque au contraire de disparaître quand on introduit les interactions multiples.

2.2.1 - Mise en évidence de la canalisation.

Nous avons simulé la canalisation des atomes de cuivre de 100 keV dans les canaux de direction $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ du cuivre cubique à faces centrées.

Nous avons constaté qu'il y a effectivement canalisation dans les directions $\langle 100 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$ (figures IV-10 à IV.12). Ces canalisations subsistent encore quand nous introduisons une petite vibration thermique. Par contre, la canalisation n'existe pas dans la direction $\langle 111 \rangle$ (figure IV.13).

Les directions $\langle 100 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$ ont des atomes disposés symétriquement par rapport à l'axe du canal, alors que la direction $\langle 111 \rangle$ n'a pas cette symétrie axiale (figure IV.14). Aux grandes énergies, cette différence n'a pas grande importance, mais aux faibles énergies l'interaction multiple dévie l'atome hors du canal s'il n'y a pas cette symétrie.

Nous concluons donc que la canalisation dans les canaux qui n'ont pas une symétrie axiale n'est qu'un phénomène des grandes énergies.

2.2.2 - Mise en évidence de la focalisation.

La mise en évidence de la focalisation se fait en faisant partir un atome avec une certaine énergie cinétique initiale dans une direction choisie aléatoirement par rapport au réseau cristallin. En visualisant les trajectoires des atomes avec notre programme SUZANNA, nous pouvons constater que ces trajectoires ont des directions voisines de celles des rangées de grande densité atomique et conclure qu'il y a focalisation. Nous pouvons aussi faire partir un atome du solide dans une direction proche de celle d'une rangée de grande densité atomique et constater que les collisions se succèdent le long de cette rangée (figures IV-15 et IV-16). Ces deux méthodes ont déjà été utilisées par le groupe de BROOKHAVEN pour mettre en évidence la focalisation [25, 26]. Dans l'expérience dont nous faisons état au paragraphe 1.4 nous constatons qu'il y a une tendance à la focalisation des collisions dans les directions $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ou équivalentes.

Mais la mise en évidence de la focalisation la plus inattendue est obtenue en simulant une canalisation. Nous avons simulé des canalisations dans les directions $\langle 100 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$. Nous avons trouvé que les atomes qui entourent le canal ont des trajectoires dont les directions sont proches de celles des rangées de grande densité atomique, c'est-à-dire les directions $\langle 110 \rangle$ ou équivalentes pour le système cubique à faces centrées (figures IV-10 à IV-12). L'étude des énergies reçues par ces atomes montre que ces énergies ne dépassent pas une demi-douzaine d'électron-volts et que la plupart ne dépassent pas l'électron-volt. Nous pouvons donc conclure que les petites transmissions d'énergies se font suivant les rangées de plus grande densité atomique, mais qu'il n'y a pas forcément transport atomique.

Du point de vue de la transmission latérale d'énergie, nous pensions qu'un atome focalisé se comporte comme un atome canalisé dans un canal plus grand et nous avons espéré avoir le même résultat avec les focalisations dans les directions $\langle 100 \rangle$

et $\langle 110 \rangle$ (figures IV-15 et IV-16), nous ne l'avons pas trouvé parce que le "canal" est trop grand, il n'y a que très peu de transmission latérale de l'énergie.

2.2.3 - Calcul du facteur de focalisation.

Nous calculons le facteur de focalisation de la même façon que le groupe de BROOKHAVEN [25]. Nous définissons l'angle fait par la trajectoire d'un atome de la rangée de focalisation avec la direction de cette rangée comme étant l'angle fait par la vitesse de cet atome avec la direction de focalisation quand celui-ci a le maximum d'énergie cinétique. Le facteur de focalisation est le rapport des angles des trajectoires de deux atomes successifs de la rangée de focalisation avec la direction de cette rangée de focalisation. Le facteur de focalisation est calculé en fonction du maximal de l'énergie cinétique du premier atome considéré.

En réseau supposé statique, nous constatons que le facteur de focalisation est inférieur à l'unité pour une énergie inférieure à une vingtaine ou une trentaine d'électron-volts (figure IV-17). Ce résultat est en accord avec les conclusions du groupe de BROOKHAVEN. Si nous introduisons une petite vibration atomique correspondant à 15°K, nous voyons que la dispersion des résultats est tellement importante que la notion de facteur de focalisation n'a aucun sens (figure IV-17). Etant donnée cette constatation nous trouvons inutile de faire une étude à des températures plus élevées nous ne pouvons y trouver une moindre dispersion dans les résultats. Nous avons vu au paragraphe 1.4.4. que, même si le facteur de focalisation n'a pas de sens, il y a toujours une tendance à l'alignement des collisions.

III - ECHANGES D'ENERGIE EN FOCALISATION.

Dans le modèle de collisions binaires MARLOWE, quand le projectile passe à mi-distance entre deux ou plusieurs atomes du solide, le résultat en est le suivant :

- les atomes cibles reçoivent une impulsion qui correspond à la collision binaire avec le projectile seul ;
- le projectile a une impulsion après la collision égale à la différence vectorielle de l'impulsion avant la collision avec la somme des impulsions qu'il a communiquées aux autres atomes.

Nous allons calculer analytiquement les échanges d'énergies avec ce modèle que nous appellerons modèle de collisions multiples et les comparer avec ceux que nous trouvons avec le modèle d'interactions multiples qui est plus rigoureux. Il est évident que le modèle de collisions multiples est faux quand l'atome incident a une énergie trop faible (inférieure à une cinquantaine d'électron-volts) car, dans ce cas, la somme des énergies perdues par les collisions binaires peut être supérieure à l'énergie cinétique initiale de l'atome incident lui-même. Mais, dans certains cas, comme la focalisation dans la direction de plus grande densité atomique, les atomes entourent la trajectoire de l'atome incident sont tellement éloignés de celui-ci que les énergies reçues par ces atomes sont négligeables devant l'énergie initiale de l'atome incident. Ce sont donc ces cas-là que nous allons étudier.

3.1 - Cas de la focalisation idéale en réseau supposé statique.

3.1.1 - Cas général de la collision simultanée.

Nous admettons quatre hypothèses :

- (a) Le réseau cristallin est statique, c'est-à-dire que tous les atomes du solide sont exactement à leur site d'équilibre.

(b) Les trajectoires des atomes de la rangée de focalisation sont rigoureusement confondues avec la rangée de focalisation.

(c) Les atomes qui entourent la rangée de focalisation sont disposés en symétrie binaire par rapport à cette rangée de focalisation de façon à ce que les trajectoires restent parfaitement rectilignes sur cette rangée de focalisation.

(d) Les frottements électroniques sont négligeables.

Les collisions entre atomes d'une rangée de focalisation sont des collisions frontales avec des échanges intégraux d'énergie. Les collisions entre l'atome de la rangée de focalisation avec les atomes qui entourent la rangée de focalisation sont des collisions dont les paramètres d'impact sont grands par rapport à la portée du potentiel interatomique.

Nous pouvons donc supposer que les atomes qui entourent la rangée de focalisation ne peuvent se déplacer que faiblement sous l'influence de l'atome incident et comme la trajectoire du projectile est rectiligne l'angle de déviation dans le système de centre de masse est faible.

Nous savons que quand l'angle de déviation Θ dans le système de centre de masse est faible on peut le calculer par [115].

$$\Theta = \frac{M_1 + M_2}{M_2} \frac{\rho}{E} \int_0^{1/\rho} \frac{\partial U}{\partial u} \cdot \frac{udu}{(1 - \rho^2 u^2)^{1/2}} \quad (\text{IV.16})$$

M_1, M_2 = masses respectives du projectile et de la cible

ρ = distance minimale d'approche

$\partial U / \partial u$ = dérivée du potentiel interatomique par rapport à l'inverse u de la distance

E_0 = énergie cinétique initiale de l'atome incident

Et l'énergie reçue par la cible est

$$E_2 = \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \sin^2 \frac{\Theta}{2} \quad (\text{IV.17})$$

Comme Θ est petit devant l'unité, nous pouvons faire $\sin \frac{\Theta}{2} \approx \frac{\Theta}{2}$ et avoir d'après l'équation (IV.16) :

$$\begin{aligned} E_2 &\simeq E_0 \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \times \frac{(M_1 + M_2)^2}{M_2^2} \times \frac{1}{4} \times \frac{\rho^2}{E_0} \left[\int_0^{1/\rho} \frac{\partial U}{\partial u} \cdot \frac{udu}{(1 - \rho^2 u^2)^{1/2}} \right]^2 \\ &= \frac{1}{E_0} \cdot \frac{M_1}{M_2} \left[\rho \int_0^{1/\rho} \frac{\partial U}{\partial u} \cdot \frac{udu}{(1 - \rho^2 u^2)^{1/2}} \right]^2 \end{aligned} \quad (\text{IV.18})$$

Nous voyons que l'échange d'énergie est inversement proportionnelle à l'énergie cinétique initiale E_0 du projectile.

Quand le projectile traverse le $n^{\text{ième}}$ plan atomique perpendiculaire à sa trajectoire, il perd une énergie totale de :

$$\Delta E = \frac{M_1}{E} \sum_i \frac{N_i^n}{M_i} \left[\rho_i \int_0^{1/\rho_i} \frac{\partial U}{\partial u} \cdot \frac{udu}{(1 - \rho_i^2 u^2)^{1/2}} \right]^2 \quad (\text{IV.19})$$

E = énergie du projectile avant la traversée du plan atomique

N_i^n = nombre d'atomes de type i sur le plan atomique distants de la trajectoire du projectile de la distance ρ_i .

M_i = masse des atomes de type i .

Après la traversée du $n^{\text{ième}}$ plan atomique, l'énergie du projectile sera donc :

$$E_{n+1} = E_n - \frac{A_n}{E_n} = E_n \left(1 - \frac{A_n}{E_n^2} \right) \quad (\text{IV.20})$$

E_n = énergie du projectile avant le $n^{\text{ième}}$ plan atomique

$$A_n = M_1 \sum_i \frac{N_i}{M_i} \left[\rho_i \int_0^{1/\rho_i} \frac{\partial U}{\partial u} \cdot \frac{udu}{(1 - \rho_i^2 u^2)^{1/2}} \right]^2 \quad (\text{IV.21})$$

En partant de la suite définie par l'équation (IV.20) nous avons :

$$E_1 = E_0 \left(1 - \frac{A_0}{E_0^2} \right) \quad (\text{IV.22})$$

$$E_2 = E_1 \left(1 - \frac{A_1}{E_1^2} \right) = E_0 \left(1 - \frac{A_0}{E_0^2} \right) \left[1 - \frac{A_1}{E_0^2 \left(1 - \frac{A_0}{E_0^2} \right)^2} \right] \quad (\text{IV.23})$$

d'où

$$E_2 = E_0 \left(1 - \frac{A_0}{E_0^2} \right) \left[1 - \frac{A_1}{E_0^2 \left(1 - \frac{2A_0}{E_0^2} + \frac{A_0^2}{E_0^4} \right)} \right] \quad (\text{IV.24})$$

Comme nous avons supposé que :

$$\frac{A_0}{E_0^2} \ll 1 \quad \text{et} \quad \frac{A_1}{E_0^2} \ll 1 \quad (\text{IV.25})$$

nous pouvons donc approximer E_2 par :

$$E_2 \simeq E_0 \left(1 - \frac{A_0}{E_0^2} - \frac{A_1}{E_0^2} \right) = E_0 \left(1 - \frac{A_0 + A_1}{E_0^2} \right) \quad (\text{IV.26})$$

Si, par itération, nous avons :

$$E_n = E_0 \left(1 - \frac{\sum_{j=0}^{n-1} A_j}{E_0^2} \right) \quad (\text{IV.27})$$

nous devrions avoir aussi :

$$E_{n+1} = E_0 \left(1 - \frac{\sum_{j=0}^{n-1} A_j}{E_0^2} \right) \left(1 - \frac{A_n}{E_0^2 \left(1 - \frac{\sum_{j=0}^{n-1} A_j}{E_0^2} \right)^2} \right) \quad (\text{IV.28})$$

Toujours parce que $A_n/E_0^2 \ll 1$, nous pouvons approximer E_{n+1} par

$$E_{n+1} \simeq E_0 \left(1 - \frac{\sum_{j=0}^{n-1} A_j}{E_0^2} - \frac{A_n}{E_0^2} \right) = E_0 \left(1 - \frac{\sum_{j=0}^n A_j}{E_0^2} \right) \quad (\text{IV.29})$$

E_0 étant l'énergie du projectile avant la traversée du premier plan atomique. Ce qui vérifie bien l'équation (IV.27).

3.1.2 - Application aux focalisations.

Avec une focalisation idéale dans un réseau statique, les collisions entre les atomes de la rangée de focalisation sont frontales. Il y a donc échange intégral de l'énergie. Le $(n+1)^{\text{ième}}$ atome de la rangée reçoit du $n^{\text{ième}}$ atome une énergie égale à l'énergie cinétique initiale du $n^{\text{ième}}$ atome ôté de l'énergie communiquée aux atomes qui entourent la rangée de focalisation.

Dans le domaine d'énergies inférieures à une cinquantaine d'électron-volts nous pensons que les directions de focalisation qui permettent de satisfaire à la condition de l'inégalité (IV.25) sont $\langle 110 \rangle$ pour le système cubique à faces centrées et $\langle 111 \rangle$ pour le système cubique centré. Nous avons d'après l'équation (IV.29) l'énergie reçue par le $n^{\text{ième}}$ atome égale à

$$E_n = E_0 \left[1 - n \frac{A_1 + A_2}{E_0^2} \right] \quad (\text{IV.30})$$

pour la focalisation dans la direction $\langle 110 \rangle$ du système cubique à faces centrées, avec :

A_1 et A_2 = respectivement les valeurs des A de l'équation (IV.20) pour les plans $2n$ et $2n+1$ et :

$$E_n = E_0 \left[1 - n \frac{A_1 + A_2 + A_3}{E_0^2} \right] \quad (\text{IV.31})$$

pour la focalisation dans la direction $\langle 111 \rangle$ du système cubique centré.

A_1 , A_2 et A_3 = respectivement les valeurs des A de l'équation (IV.20) pour les plans $3n$, $3n+1$ et $3n+2$.

Nous avons vérifié ce résultat avec la focalisation dans la direction $\langle 110 \rangle$ du cuivre cubique à faces centrées. A part une perte initiale de l'énergie que nous pensons pouvoir attribuer à l'énergie de liaison de l'atome à son site, nous avons trouvé que les atomes de la rangée de focalisation reçoivent une énergie qui décroît linéairement en fonction de leur rang.

3.2 - Cas de la focalisation imparfaite ou en réseau avec vibrations thermiques.

3.2.1 - Cas général.

Quand il y a focalisation imparfaite ou focalisation dans un réseau avec vibrations thermiques, (a) les paramètres d'impact avec les atomes entourant la rangée de focalisation sont légèrement différents de ce qu'ils auraient pu être en focalisation idéale en réseau statique et (b) les collisions entre les atomes de la rangée de focalisation ne sont plus des collisions frontales. L'énergie reçue par le $(n+1)^{i\text{ème}}$ atome de la rangée de focalisation est donc :

$$E_{n+1} = E_p (1 - \epsilon_n) \left(1 - \frac{A_p}{E_p} - \frac{1}{E_p} \sum_{ij} \frac{\partial A_p}{\partial \rho_i} \delta \rho_{ij} \right) \quad (\text{IV.32})$$

E_p = énergie du $n^{i\text{ème}}$ atome avant la collision

A_p = valeur calculée à partir de l'équation (IV.21)

p = indice du plan du $(n+1)^{i\text{ème}}$ atome perpendiculaire à la rangée de focalisation

$\delta \rho_{ij}$ = variation de la distance du $j^{i\text{ème}}$ atome dont la distance à la trajectoire du projectile aurait dû être ρ_i si la focalisation était idéale et avait lieu dans un réseau statique

ϵ_n = proportion d'énergie restante au $n^{i\text{ème}}$ atome parce que la collision n'est pas frontale.

Comme les $\delta \rho_{ij}$ sont faibles devant les ρ_i et sont en plus de signes différents, nous pouvons supposer que :

$$\sum_{ij} \frac{\partial A_p}{\partial \rho_i} \delta \rho_{ij} \quad (\text{IV.33})$$

soit négligeable devant A_p .

L'équation (IV.32) devient donc :

$$E_{n+1} \simeq E_p (1 - \epsilon_n) \left(1 - \frac{A_p}{E_p} \right) \quad (\text{IV.34})$$

Nous supposons à nouveau comme dans le modèle MARLOWE que la collision entre le $n^{i\text{ème}}$ et le $(n+1)^{i\text{ème}}$ atome de la rangée de focalisation est une collision binaire après avoir tenu compte de l'interaction des atomes entourant la rangée de focalisation. Dans ce cas, l'angle de diffusion dans le système du centre de masse est :

$$\varphi_n = \pi - 2 \chi_n \quad (\text{IV.35})$$

$$\chi_n = \int_0^{1/\rho_0} \frac{du}{\left[1 - \frac{U(u)}{E_r} - \rho^2 u^2 \right]^{1/2}} \quad (\text{IV.36})$$

$U(u)$ = potentiel interatomique en fonction de l'inverse de la distance

ρ = paramètre d'impact

ρ_0 = distance minimale d'approche

$E_R = \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_P$, énergie du projectile dans le système du centre de masse.

Et l'énergie du $n^{\text{ième}}$ atome après la collision est :

$$E_{n+1}^{**} = \left[1 - \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \cos^2 \gamma_n \right] E_{n+1}^* \quad (\text{IV.37})$$

avec

$$E_{n+1}^* = E_P \left(1 - \frac{A_P}{E_P} \right) \quad (\text{IV.38})$$

Par conséquent, l'énergie du $(n+1)^{\text{ième}}$ atome de la rangée de focalisation sera :

$$E_{n+1} = \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_{n+1}^* \cos^2 \gamma_n \quad (\text{IV.39})$$

Comme ρ est très petit devant la portée du potentiel, l'angle γ_n est petit devant l'unité et nous avons :

$$\cos \gamma_n \simeq 1 - \gamma_n^2 \quad (\text{IV.40})$$

Donc :

$$E_{n+1} = \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_{n+1}^* (1 - \gamma_n^2) \quad (\text{IV.41})$$

d'où

$$\epsilon_n = 1 - \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} (1 - \gamma_n^2) \quad (\text{IV.42})$$

Avec un métal mono-atomique, nous avons $M_1 = M_2$ et

$$\epsilon_n = \gamma_n^2 \quad (\text{IV.43})$$

Comme $\gamma_n = 0$ pour $\rho = 0$, nous avons pour une petite valeur de ρ :

$$\gamma_n \simeq \frac{\partial \gamma_n}{\partial \rho} \rho \quad (\text{IV.44})$$

En constatant à nouveau que ρ est très petit devant la portée du potentiel, nous pouvons prendre $1/\rho_0$ telle que $U(1/\rho_0) = E_R$ et l'intégrale de l'équation (IV.36) devient une intégrale aux bornes fixes. En dérivant cette équation par rapport à ρ , nous avons d'après l'équation (IV.36)

$$\frac{d \gamma_n}{d \rho} \simeq \int_0^{1/\rho_0} \frac{du}{g(u)} + 2 \rho^2 \int_0^{1/\rho_0} \frac{u^2 du}{[g(u)]^3} \quad (\text{IV.45})$$

avec

$$g(u) = \left[1 - \frac{U(u)}{E_R} - \rho^2 u^2 \right]^{1/2} \quad (\text{IV.46})$$

Donc :

$$\gamma_n \simeq \rho \left\{ \int_0^{1/\rho_0} \frac{du}{g(u)} + 2 \rho^2 \int_0^{1/\rho_0} \frac{u^2 du}{[g(u)]^3} \right\} \quad (\text{IV.47})$$

3.2.2 - Application à la focalisation dans la direction <110> du système cubique à faces centrées.

En traversant le premier plan atomique le premier atome ne rencontre pas d'atomes sur sa trajectoire et son énergie est, d'après l'équation (IV.20),

$$E_1 = E_0 \left(1 - \frac{A_1}{E_0^2} \right) \quad (\text{IV.48})$$

En traversant le deuxième plan atomique il communique une énergie E_2 au deuxième atome, d'après l'équation (IV.34)

$$E_2 = E_1 (1 - \epsilon_1) \left(1 - \frac{A_2}{E_1^2} \right) \quad (\text{IV.49})$$

$$E_2 = E_0 (1 - \epsilon_1) \left(1 - \frac{A_1}{E_0^2} \right) \left[1 - \frac{A_2}{E_0^2 \left(1 - \frac{A_1}{E_0^2} \right)^2} \right] \quad (\text{IV.50})$$

Comme A_1/E_0^2 et A_2/E_0^2 sont très petits devant l'unité, nous avons :

$$E_2 \simeq E_0 (1 - \epsilon_1) \left(1 - \frac{A_1 + A_2}{E_0^2} \right) \quad (\text{IV.51})$$

En traversant le troisième plan atomique, le deuxième atome ne rencontre pas d'atomes et a, d'après l'équation (IV.20), une énergie de :

$$\begin{aligned} E_3 &= E_2 \left(1 - \frac{A_1}{E_2^2} \right) \\ &= E_0 (1 - \epsilon_1) \left(1 - \frac{A_1 + A_2}{E_0^2} \right) \left[1 - \frac{A_1}{E_0^2 (1 - \epsilon_1)^2 \left[1 - \frac{A_1 + A_2}{E_0^2} \right]} \right] \end{aligned} \quad (\text{IV.52})$$

Comme $(A_1 + A_2)/E_0^2$ et A_1/E_0^2 sont très petits devant l'unité, nous avons :

$$E_3 \simeq E_0 (1 - \epsilon_1) \left[1 - \frac{2 A_1 + A_2}{E_0^2 (1 - \epsilon_1)^2} \right] \quad (\text{IV.53})$$

En traversant le quatrième plan atomique, il communique au troisième atome de la rangée de focalisation une énergie E_4 conformément à l'équation (IV.34)

$$E_4 = E_3 (1 - \epsilon_2) \left(1 - \frac{A_2}{E_3}\right) \quad (\text{IV.54})$$

$$= E_0 (1 - \epsilon_1) (1 - \epsilon_2) \left[1 - \frac{2 A_2 + A_2}{E_0^2 (1 - \epsilon_1)^2}\right] \cdot \left[1 - \frac{A_2}{E_0^2 (1 - \epsilon_1) \left[1 - \frac{2A_1 + A_2}{E_0^2 (1 - \epsilon_1)}\right]}\right]$$

Toujours d'après les mêmes raisons que précédemment, nous avons :

$$E_4 = E_0 (1 - \epsilon_1) (1 - \epsilon_2) \left[1 - \frac{2 A_1 + A_2}{E_0^2 (1 - \epsilon_1)}\right] \quad (\text{IV.55})$$

Et ainsi de suite, le $n^{\text{ième}}$ atome de la rangée de focalisation recevra une énergie de

$$E_{2(n-1)} = E_0 \prod_{j=1}^{n-2} (1 - \epsilon_j) \cdot \left[1 - \frac{A_1 + A_2}{E_0^2} - \sum_{j=1}^{n-2} \frac{A_1 + A_2}{E_0^2 \prod_{i=1}^j (1 - \epsilon_i)^2}\right] \quad (\text{IV.56})$$

et, après avoir traversé le $(2n)^{\text{ième}}$ plan atomique, il aura une énergie de

$$E_{2n-1} = E_{2(n-1)} \left[1 - \frac{A_1}{E_{2(n-1)}^2}\right] \quad (\text{IV.57})$$

ou, après le même genre de calcul que précédemment, nous avons :

$$E_{2n-1} \simeq E_0 \prod_{j=1}^{n-2} (1 - \epsilon_j) \cdot \left[1 - \frac{2 A_1 + A_2}{E_0^2} - \sum_{j=1}^{n-2} \frac{A_1 + A_2}{E_0^2 \prod_{i=1}^j (1 - \epsilon_i)^2}\right] \quad (\text{IV.58})$$

En traversant le $(2n+1)^{\text{ième}}$ plan atomique, il communique au $(n+1)^{\text{ième}}$ atome de la rangée de focalisation une énergie E_{2n} :

$$E_{2n} = E_{2n-1} (1 - \epsilon_{n-1}) \cdot \left[1 - \frac{A_2}{E_{2n}^2}\right] \quad (\text{IV.59})$$

D'où, comme précédemment :

$$E_{2n} \simeq E_0 \prod_{j=1}^{n-1} (1 - \epsilon_j) \cdot \left[1 - \frac{A_1 + A_2}{E_0^2} - \sum_{j=1}^{n-1} \frac{A_1 + A_2}{E_0^2 \prod_{i=1}^j (1 - \epsilon_i)^2}\right] \quad (\text{IV.60})$$

A mesure qu'il y a perte d'énergie sur la rangée de focalisation, les intégrales :

$$\int_0^{1/\rho_0} \frac{du}{g(u)} \quad \text{et} \quad \int_0^{1/\rho_0} \frac{u^2 du}{[g(u)]^3}$$

tendent vers zéro parce que la borne $1/\rho_0$ tend vers zéro. La valeur de ϵ_n à partir d'un certain nombre N peut donc être considéré comme très petit devant l'unité et l'équation (IV.60) devient :

$$E_{2n} \simeq E_0 \prod_{j=1}^{N-1} (1 - \epsilon_j) \cdot (1 - \sum_{j=N}^n \epsilon_j) \times \left[1 - \frac{A_1 + A_2}{E_0^2} - \sum_{j=1}^N \frac{A_1 + A_2}{E_0^2 \prod_{i=1}^j (1 - \epsilon_i)^2} - \frac{A_1 + A_2}{E_0^2 \prod_{i=1}^N (1 - \epsilon_i)^2} \cdot \sum_{j=N}^n \left(1 + 2 \sum_{i=N}^n \epsilon_i \right) \right] \quad (\text{IV.61})$$

ou encore :

$$E_{2n} \simeq E_0 \prod_{j=1}^{N-1} (1 - \epsilon_j) \left\{ 1 - \sum_{j=N}^n \epsilon_j - \frac{A_1 + A_2}{E_0^2} \left[1 + \sum_{j=1}^N \frac{1}{\prod_{i=1}^j (1 - \epsilon_i)^2} + \frac{n - N + 2 \sum_{j=N}^n \left(\sum_{i=j}^n \epsilon_i \right)}{\prod_{i=1}^N (1 - \epsilon_i)^2} \right] \right\} \quad (\text{IV.62})$$

Nous pouvons constater :

(a) D'après l'équation (IV.60) que, à cause du facteur $\prod_{j=1}^{N-1} (1 - \epsilon_j)$, l'énergie diminue très rapidement quand n augmente jusqu'à N,

(b) Mais que, d'après l'équation (IV.62), à partir de N, l'énergie des atomes focalisés décroît pratiquement linéairement en fonction de n parce que l'augmentation du terme $\sum_{j=N}^n \sum_{i=j}^n (\epsilon_i)$ devient négligeable.

C'est ce que nous constatons effectivement (figure IV-18-a) quand nous simulons des focalisations dans la direction $\langle 110 \rangle$ du cuivre cubique à faces centrées avec des angles de déviation de 1, 2, 3 et 4 degrés dans le plan (100). Nous trouvons toujours le même décrochement initial de l'énergie dont nous faisons état au paragraphe 3.1.2.

Nous faisons les mêmes constatations quand nous introduisons des vibrations thermiques (figure IV-18-b), mais les résultats sont un peu dispersés autour d'une "tendance générale" (au sens où l'entendent les économistes). Cette dispersion est due au fait que les ϵ_i ne sont pas déterministes comme au paragraphe précédent, mais obtenus par tirage au sort de type Monte-Carlo. Nous en avons la preuve en constatant qu'avec une faible vibration thermique correspondant à 15 K, les résultats sont moins dispersés que quand il y a température plus élevée.

Nous voyons donc que, quand il y a focalisation dans les directions de grande densité atomique, les calculs obtenus avec le modèle d'interactions multiples d'ANGIANG et ceux obtenus avec le modèle de collisions multiples de MARLOWE sont en accord. Nous pouvons par conséquent conclure à la validité du modèle de collisions multiples quand les échanges d'énergie avec les atomes entourant la trajectoire du projectile sont faibles devant l'énergie du projectile lui-même.

Nous pouvons aussi constater une chute brutale de l'énergie sur la rangée de focalisation dès que cette focalisation n'est plus idéale. Cette chute brutale de l'énergie nous permet de conclure que la focalisation existe peut être dans la réalité mais ne permet pas d'avoir de longues chaînes de remplacements atomiques.

IV - CREATION DES DEFAUTS.

Le modèle d'interactions multiples nous permet de proposer des solutions aux trois problèmes qui concernent la création des défauts par la cascade :

- que devient l'énergie cinétique du premier atome frappé ?
- la focalisation peut-elle créer des paires de FRENKEL plus stables ?
- quelle énergie seuil de déplacements choisir pour le modèle MARLOWE ?

4.1 - Evolution de l'énergie cinétique totale.

Nous avons porté l'évolution de la somme des énergies cinétiques de tous les atomes du solide au cours du temps (figures IV-19 à IV-20). Nous voyons que cette évolution peut se décomposer en trois étapes : une baisse rapide de l'énergie cinétique à quelques oscillations près, une légère remontée, puis une stabilisation avec de légères oscillations.

La première étape correspond à la création des défauts sous l'action du premier atome frappé : des atomes reçoivent de l'énergie cinétique pour quitter leur site de réseau et gagnent donc en énergie potentielle. En vertu de la loi de la conservation de l'énergie totale, la somme des énergies cinétiques baisse. La deuxième étape correspond à la relaxation des atomes déplacés vers leurs nouvelles positions d'équilibre. Il y a alors augmentation de la somme des énergies cinétiques consécutives à une diminution de la somme des énergies potentielles. Nous avons la preuve de cette relaxation par la constatation que certains atomes arrêtés, regagnent de l'énergie cinétique quand ils vont à leur nouveau site d'équilibre. Pendant la troisième étape, les atomes vibrent autour de leur nouvelle position d'équilibre, d'où de petites oscillations dans l'énergie cinétique totale. Notre modèle ne peut nous le montrer à cause de la durée trop longue des calculs, mais nous pensons que ces vibrations s'amortissent lentement parce que les atomes communiquent leur énergie aux atomes qui les entourent.

Comme la fin de la phase dynamique se situe à la fin de la relaxation des atomes, et que la relaxation des atomes se termine vers 2×10^{-13} seconde, nous pouvons donc dire que la phase dynamique de l'effet d'irradiation ou phase de création de la cascade dure 2×10^{-13} seconde. Cette constatation justifie a posteriori les hypothèses que nous avons émises au paragraphe 1.3.3 pour le modèle de vibration atomique.

Si nous regardons l'évolution des énergies cinétiques des atomes de la rangée de focalisation de direction $\langle 110 \rangle$ du cuivre cubique à faces centrées (figure IV-20), nous voyons que plus de la moitié de l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé se retrouve au bout de 5.5×10^{-13} seconde à une trentaine de distances interatomiques plus loin, ce qui fait une vitesse de propagation d'environ 54×10^{12} distances interatomiques par seconde, soit $19.5 \times 10^3 \text{ m} \times \text{s}^{-1}$, c'est-à-dire une vitesse supérieure à la vitesse de groupe d'un phonon dans un solide. Nous pouvons donc conclure que l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé se propage par onde de choc et non pas par diffusion thermique. Cette conclusion nous aurait

conduit à renier l'existence de la pointe thermique préconisée par SEITZ et KOEHLER [79]. Avec des calculs et un raisonnement analogue, ERGINSOY et col. [25, 26] préconisent aussi la non existence de la pointe thermique.

Cependant, ce raisonnement ne concerne que le cas idéal où il n'y a ni vibrations thermiques, ni déviation de l'impulsion initiale du premier atome frappé par rapport à la rangée de grande densité atomique. Dans les cas non idéaux (figure IV-18), nous avons vu au paragraphe 3.2.2 que l'énergie de la rangée de focalisation baisse rapidement pour être inférieure à 5 eV au bout de moins d'une demi-douzaine de collisions, quand il y a vibrations thermiques. La différence entre l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé et l'énergie des atomes de la rangée de focalisation est dissipée latéralement. Cette dissipation latérale de l'énergie ajoutée à la perte par frottements électroniques (qui représente environ 30 pour cent de l'énergie d'un premier atome frappé ayant une énergie cinétique initiale d'une centaine de keV) nous conduit à conclure que, malgré la tendance à la propagation rectiligne des collisions suivant une direction de grande densité atomique, il doit y avoir une concentration de l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé dans la zone de la cascade. Pour cette raison, nous pensions qu'il y a de forte chance pour que la pointe thermique existe.

4.2 - Séquences de remplacements.

D'après ce que nous avons dit au paragraphe 2.1.3, si un atome quitte son site avec une énergie cinétique initiale d'une quarantaine d'électro-volts il aura parcouru une distance en moyenne inférieure à deux unités de paramètre, distance insuffisante pour qu'il y ait création de paires de FRENKEL stables.

Or d'après les simulations réalisées par le groupe de BROOKHAVEN [28] et que nous avons refaites nous avons vu (figures IV-5 à IV-8) qu'il y a une tendance à la focalisation des collisions suivant les directions de grande densité atomique et des séquences de remplacements sur certaines rangées de focalisation c'est-à-dire des atomes qui prennent le site de celui qui le suit dans la rangée de focalisation après lui avoir communiqué la quasi totalité de leur énergie. A la fin de la focalisation, on trouve un interstitiel dissocié très éloigné de la lacune qui est le site initial du premier atome frappé. Nous pouvons donc conclure que la focalisation permet, par des remplacements atomiques successifs, d'avoir des paires de FRENKEL dont la distance lacune-interstitiel est grande.

Quand nous introduisons des vibrations thermiques, nous constatons que les rangées de focalisation existent toujours, même si la notion de facteur de focalisation n'a plus de sens (figures IV-6 à IV-8), mais que la longueur de ces rangées de focalisation diminue quand la température augmente. Cette diminution de la longueur des rangées de focalisation s'explique par les résultats du paragraphe 3.2.2 selon lesquels l'énergie de la rangée de focalisation diminue rapidement avec la distance quand il y a vibrations thermiques.

En comparant les figures IV-9 et IV-13 nous pourrions penser que la diminution de la longueur des rangées de focalisations ne raccourcit pas les distances lacune-interstitiel. Or, en comparant les figures IV.10 et IV.14, nous constatons que la diminution de la longueur des rangées de focalisation fait disparaître deux paires de FRENKEL sur trois et, si nous regardons les figures IV-7, IV-8-c et IV-8-d, nous constatons que, avec ou sans vibrations thermiques, il n'y a aucune

création de défauts. Nous pensons que, avec un si petit nombre de simulations, il est prudent de ne pas tirer de conclusion.

4.3 - Choix de l'énergie seuil de déplacement pour le modèle de collisions binaires.

D'après les théories de KINCHIN et PEASE [71], SNYDER et NEUFELD [72], BROWN et GOEDECKE [73], LEHMANN [74], ROBINSON [75] et SANDERS [76] et les simulations de NORGETT, ROBINSON et TORRENS [35], le nombre d'atomes déplacés varie en fonction inverse de l'énergie seuil de déplacements E_d . Cela veut dire que si l'on baisse l'énergie seuil de déplacements, on augmente en même temps le nombre de déplacements atomiques. Comme on prend généralement E_d de l'ordre de quelques dizaines d'électro-volts, la diminution de E_d n'allongera pas le parcours de l'atome de façon notable, donc n'entraîne pas une grande augmentation de la zone endommagée. Donc une diminution de l'énergie seuil de déplacements entraîne une augmentation de la densité de déplacements atomiques, mais pas un élargissement important de la zone endommagée. Mais cela ne veut pas dire qu'on a aussi augmenté la densité de défauts créés dans la zone endommagée.

En effet, l'énergie seuil de déplacement définie par SEITZ n'a pas de signification physique contrairement à ce que pensent de nombreux auteurs, notamment le groupe de BROOKHAVEN [25]. Avant de justifier notre opinion, revoyons d'abord comment le groupe de BROOKHAVEN [25] détermine l'énergie seuil de déplacement. Ils ont procédé de la façon suivante :

(a) par un calcul indépendant, ils calculent la distance limite appelée rayon de recombinaison immédiate, au-delà de laquelle une paire de FRENKEL est stable (cette distance dépend de l'orientation de la paire de FRENKEL, mais cela n'a pas grande importance dans la suite de notre propos) ;

(b) ils choisissent une direction pour la vitesse initiale du premier atome frappé ;

(c) ils font partir le premier atome frappé dans cette direction avec différentes énergies cinétiques initiales ;

(d) ils constatent que, en éliminant les paires de FRENKEL dont l'interstitiel et la lacune sont séparés d'une distance inférieure au rayon de recombinaison immédiate, le nombre de paires de FRENKEL restantes est proportionnel à l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé ;

(e) ils en déduisent que l'énergie seuil de déplacement par la formule de KINCHIN et PEASE [72]

$$E_d = \frac{E}{2n(E)} \quad (\text{IV.63})$$

$n(E)$ = nombre de paires de FRENKEL restantes après recombinaison immédiate,
 E = énergie du premier atome frappé.

Nous ne pensons pas que cette énergie, ni celle obtenue en tenant compte du facteur K introduit par NORGETT, ROBINSON et TORRENS [35], soit l'énergie seuil de déplacement définie par SEITZ [113]. En effet, d'après SEITZ, quand un atome reçoit une énergie supérieure à l'énergie seuil de déplacement il quitte son site. Donc, d'après la définition, il n'a jamais été question de faire intervenir directement la création de défauts. D'après le point (a) cité plus haut, que nous confirmons d'après les calculs faits avec notre modèle DAGIANG, il existe un volume dit volume de recombinaison immédiate centré sur la lacune tel que, si un interstitiel

se trouve à l'intérieur de ce volume, il y a recombinaison immédiate de cette paire de FRENKEL par relaxation des atomes environnants. Donc le nombre $n(E)$ de paires de FRENKEL calculé par le groupe de BROOKHAVEN [25] est inférieur au nombre $\nu(E)$ de déplacements atomiques puisque dans le calcul de $\nu(E)$ on ne tient pas compte de la recombinaison immédiate. Nous reviendrons sur les recombinaisons immédiates au paragraphe suivant, mais notons que l'énergie calculée à partir de la formule précédente doit être supérieure à l'énergie seuil de déplacements. Nous devrions plutôt la définir comme étant l'énergie de création d'une paire de FRENKEL par irradiation. Cette énergie est supérieure à l'énergie de formation d'une paire de FRENKEL parce qu'elle tient compte de la dissipation de l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé hors de la zone endommagée alors que l'énergie de formation de la paire de FRENKEL n'est que la somme de l'énergie de formation d'une lacune et l'énergie de formation d'un interstitiel.

Nous pensons qu'il est inutile de considérer l'énergie seuil de déplacement comme une donnée physique en soit et qu'il faut déterminer avec précision. Elle est plutôt liée aux modèles de collision binaire qui sont les seuls à faire appel à cette notion.

En effet, l'existence d'une énergie seuil de déplacement E_d implique qu'au site d'équilibre de chaque atome il existe une barrière de potentiel de hauteur E_d , ce qui est faux. Si nous prenons le modèle à interactions multiples, qui est plus réaliste que le modèle à collisions binaires, nous pourrions constater que, dès qu'un atome a une énergie cinétique si petite soit elle, il peut se déplacer et déplacer, directement ou indirectement par l'intermédiaire des autres atomes qui l'entourent, tous les autres atomes du solide. Pour avoir l'énergie seuil de déplacement, il faudra alors diviser l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé par le double du nombre d'atomes dans le solide si on applique la formule de KINCHIN et PEASE à la lettre (à un facteur K près si l'on veut tenir compte des résultats des simulations réalisées par NORGETT, ROBINSON et TORRENS [35]) puisque tous les atomes du solide se sont déplacés de leur site d'une distance plus ou moins importante. Etant donné le grand nombre d'atomes dans le solide, il faudra admettre que l'énergie seuil de déplacement est pratiquement nulle. Etant donné que le nombre d'atomes dans le solide est une constante pour un solide donné, il faudra admettre aussi que l'énergie seuil de déplacement est proportionnelle à l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé, ce qui enlève toute valeur de constante physique à cette énergie.

On pourrait arguer que seuls seront tenus en compte les déplacements atomiques suffisamment importants. Mais, dans ce cas, on introduit une notion arbitraire qui conduit à une valeur arbitraire de l'énergie seuil de déplacement.

Nous pouvons donc conclure que l'énergie seuil de déplacement n'est qu'une notion abstraite d'un usage commode dans les modèles de collisions binaires, mais qu'elle ne représente aucune réalité physique. D'après cette conclusion, une question se pose : dans les modèles de collisions binaires où il est commode d'introduire la notion d'énergie seuil de déplacement comme le modèle MARLOWE par exemple, quelle valeur doit-on prendre pour cette énergie ?

Nous pensons que nous devons prendre l'énergie seuil de déplacement supérieure à l'énergie de coupure. En effet, si l'énergie de coupure du projectile E_c est inférieure à l'énergie seuil de déplacement E_d , le mécanisme de création des

défauts reste intact dans le modèle MARLOWE et nous continuons à avoir la formule de NORGETT, ROBINSON et TORRENS [35]

$$\nu(E) = K \frac{E}{2 E_d} \quad (\text{IV.64})$$

Mais si E_c est supérieure à E_d tout se passerait comme si l'on ne tient plus compte des atomes qui ont une énergie cinétique inférieure à E_c , même si celle-ci est supérieure à E_d . Donc, dans le raisonnement de KINCHIN et PEASE [71], on devrait remplacer E_d par E_c et la formule de NORGETT, ROBINSON et TORRENS [35] deviendrait

$$\nu(E) = K \frac{E}{2 E_c} \quad (\text{IV.65})$$

Nous aurions dû tenir compte de cette possibilité, si elle ne conduit pas à une contradiction : un atome qui est déplacé de son site sans avoir une énergie cinétique suffisante pour être considéré comme pouvant être en mouvement. Comme les énergies seuil de déplacement et de coupure sont à choisir arbitrairement, nous pouvons nous en tenir à la condition :

$$E_c < E_d \quad (\text{IV.66})$$

Le nombre de paires de FRENKEL stables peut alors être calculé à partir de la formule (V-30) que nous avons trouvée empiriquement au chapitre V.

Tableau IV.1

ENERGIES DE CONFIGURATION DE QUELQUES CONFIGURATIONS D'INTERSTITIELS DANS LE FER-ALPHA AVEC LE POTENTIEL DE JOHNSON

Configurations	Energies de configurations (eV)	Différences avec la configuration I1 (eV)	
		D.D.C. [114]	JOHNSON [101]
I1	3.070	-	-
I2	3.375	0.305	0.32
I3	4.151	1.081	1.12
I4	4.342	1.272	1.29
I5	3.037	- 0.032	
I6	2.790	- 0.279	

Les configurations sont indiquées sur la figure IV-4.

Tableau IV.2

ENERGIES DE LIAISON DE QUELQUES CONFIGURATIONS DE BILACUNES ET DE TRILACUNES DE FER-ALPHA AVEC LE POTENTIEL DE JOHNSON

Configurations	Energies de configuration (eV)	Energies de liaison (eV)	
		D.D.C. [114]	JOHNSON [101]
Monolacune	2.910	-	-
Bilacune	2V1 (1)	0.132	0.13
	2V2 (2)	0.185	0.20
	2V3 (3)	- 0.030	
	2V4 (4)	0.047	0.05
	2V5 (5)	- 0.011	
	2V6 (6)	- 0.032	
	2V7 (7)	- 0.012	
	2V8 (8)	0.007	
	2V9 (9)	0.009	
	2V10 (10)	- 0.005	
	2V11 (11)	0.002	
Trilacune	3V1	0.255	
	3V2	0.487	
	3V3	0.271	

Les configurations sont indiquées sur la figure IV-4

Tableau IV.3

ENERGIES DE FORMATION AVEC LE POTENTIEL DE JOHNSON

Energie de formation (eV)	D.D.C. [114]	JOHNSON [101]
Monolacune fer-alpha	1.373	1.37
Monolacune tungstène	4.964	4.96
Monointerstitiel fer-alpha	4.607	4.65
Monointerstitiel tungstène	-	9.77

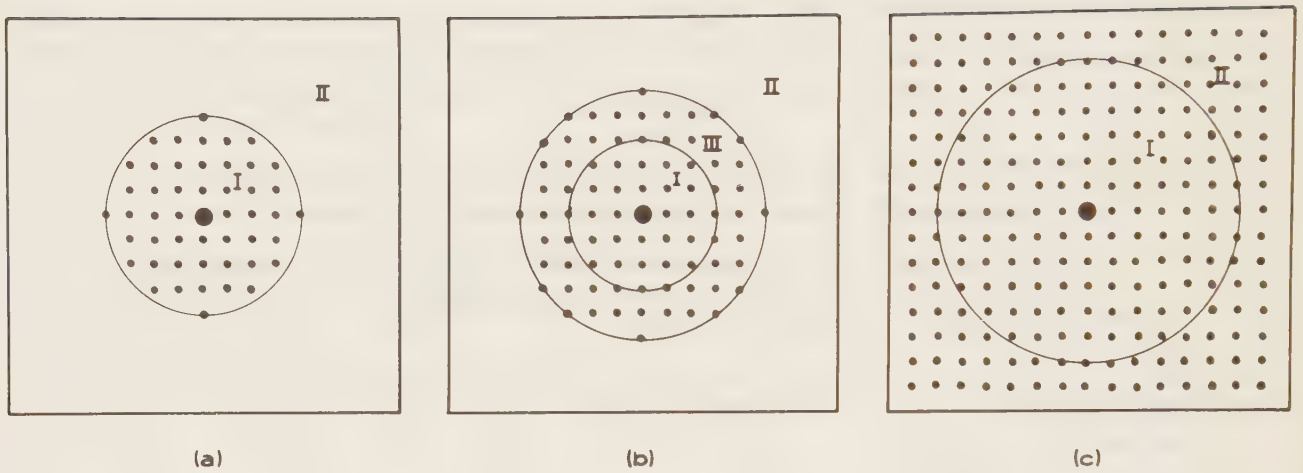


Figure IV-1

Modèles de cristal autour d'un défaut

- (a) modèle de MOTT et LITTLETON [105]
- (b) modèle de TEWORDT [106]
- (c) modèle de COTTERILL et DOYAMA [107]

• atome (discret)
 ● défaut
 □ continuum élastique

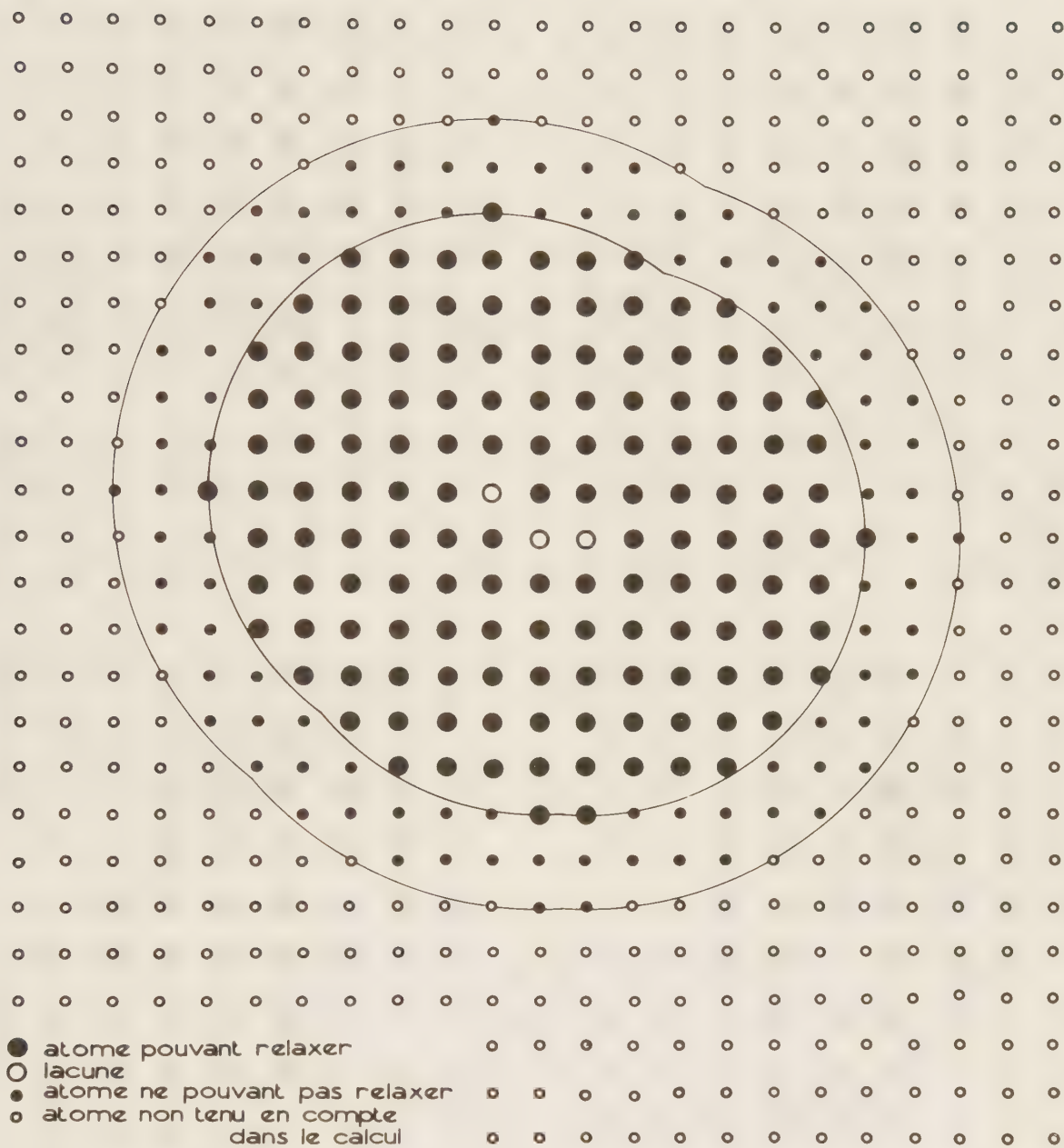
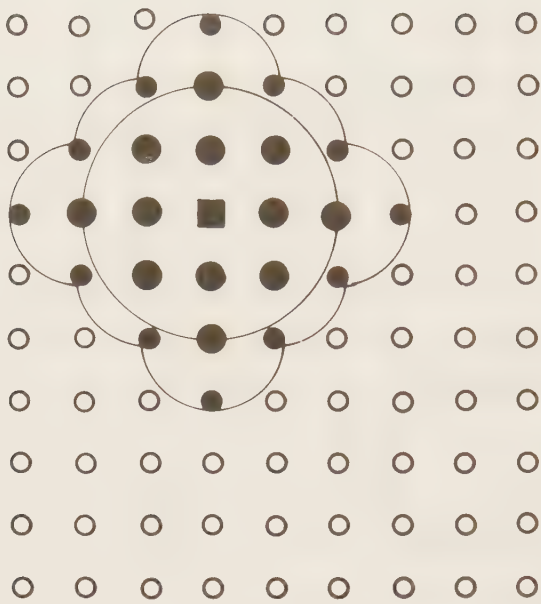
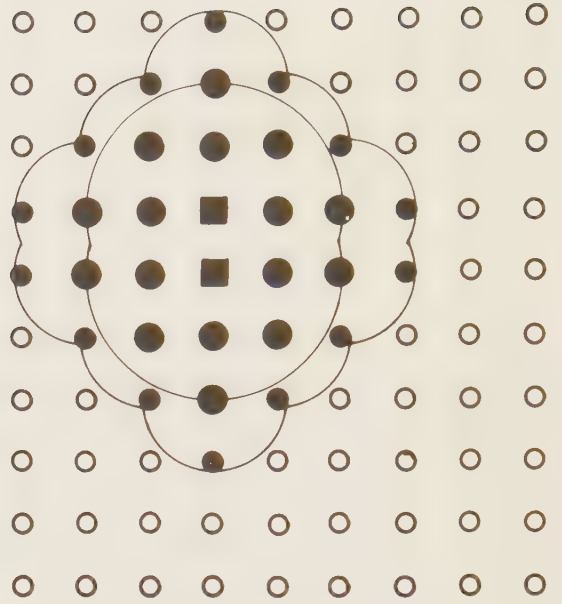


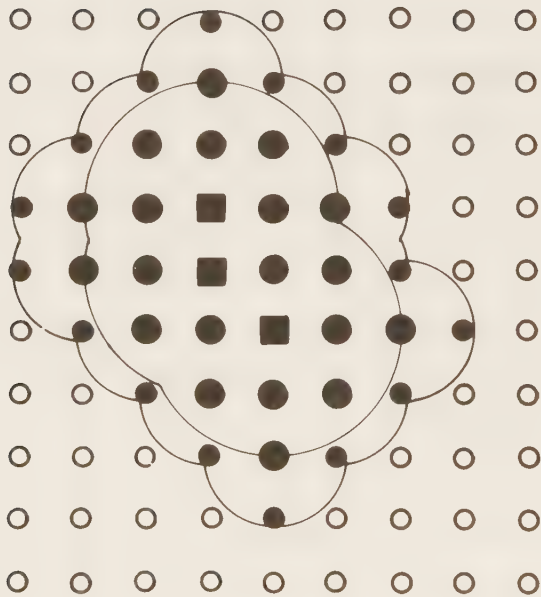
Figure IV-2
Exemple de trilacune dans un réseau carré



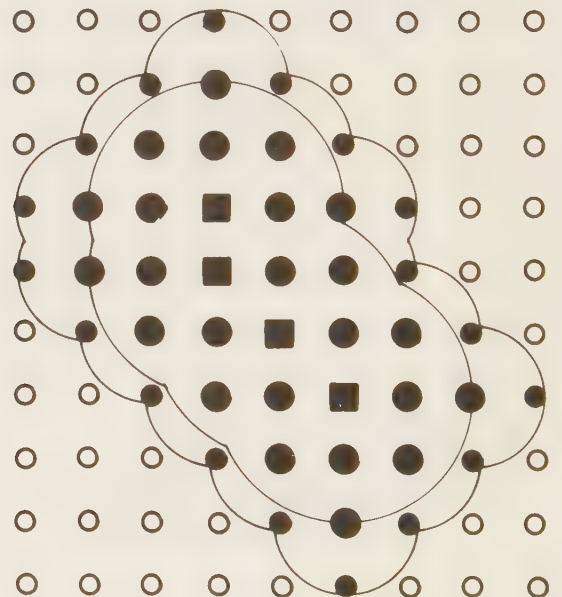
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure IV-3

Exemple de création du cristal suivant le développement de la cascade dans un réseau carré

- atome ayant une certaine énergie
- atome mobile
- atome fixe
- atome non tenu en compte

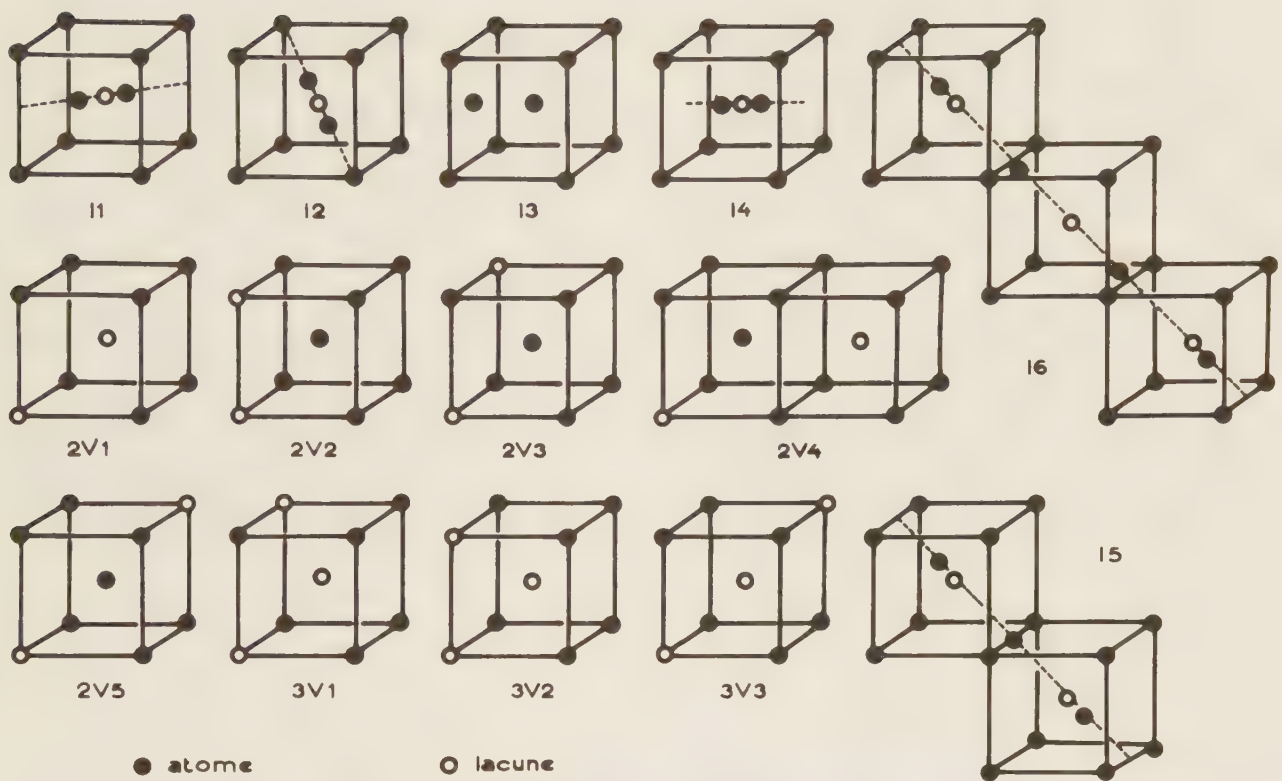


Figure IV-4
Exemples de configurations de défauts dans un réseau cubique centré



Figure IV-5

Simulations numériques de GIBSON et col. [28]

Le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB2 (cf. annexe I). Le réseau est supposé statique

Le premier atome frappé a une impulsion initiale correspondant à 40 eV faisant dans le plan $\{001\}$

(a) un angle de 22,5 degrés avec la direction $\langle 100 \rangle$

(b) un angle de 15 degrés avec la direction $\langle 100 \rangle$

Le cristal étudié est un monocristal de cuivre supposé en réseau statique

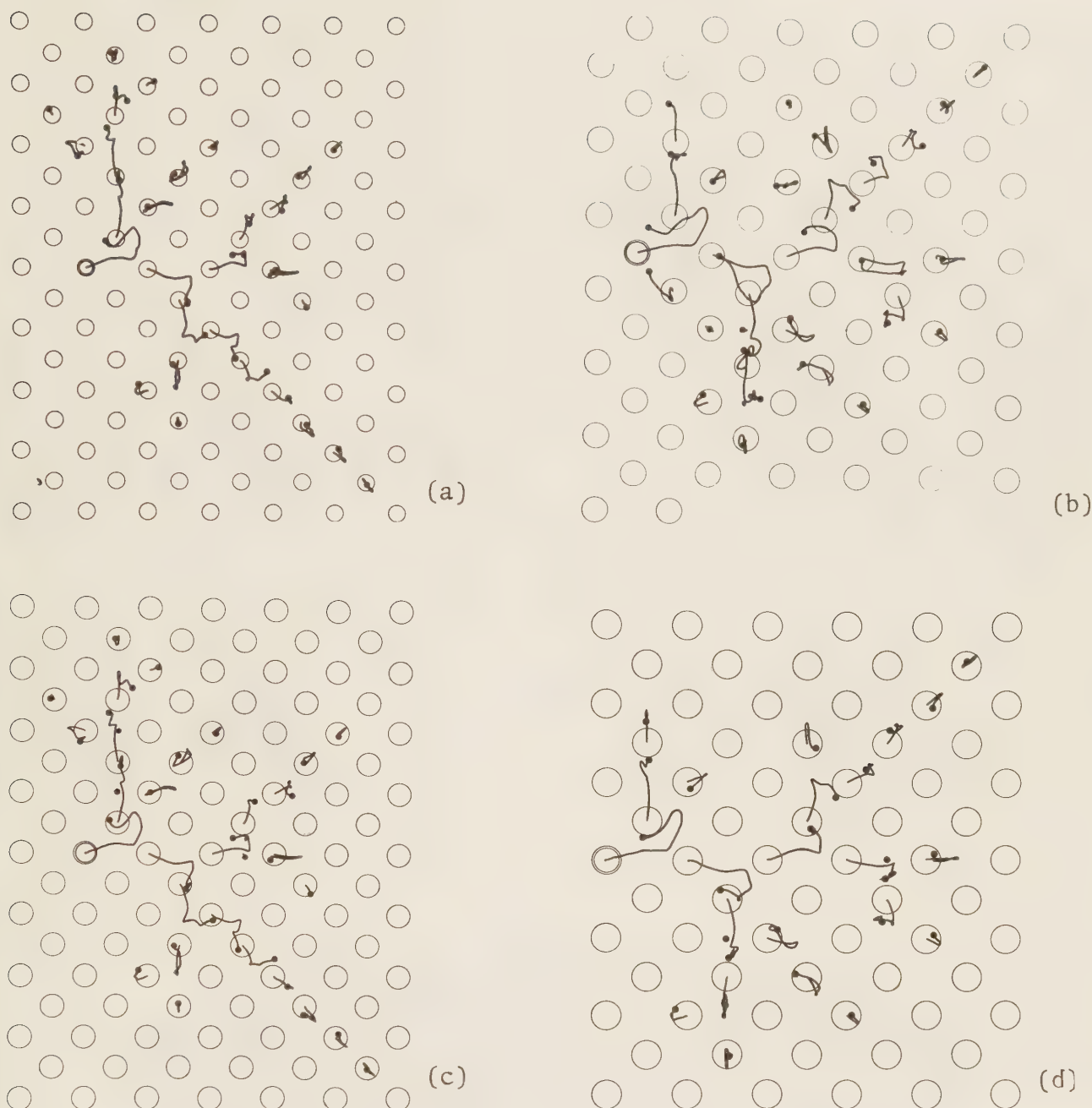


Figure IV-6

Simulations numériques avec le modèle ANGLANG
Trajectoires des atomes énergiques de la cascade

Les cercles représentent les sites des atomes du plan du premier atome frappé. La position du premier atome frappé est indiquée par deux cercles concentriques. Les gros points indiquent les positions finales des atomes énergiques. Les calculs sont arrêtés quand aucun atome n'a une énergie cinétique supérieure à un électron-volt. Le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB2

(cf. annexe I)

Le solide étudié est un monocristal de cuivre supposé en réseau statique

- (a) et (b), trois couches d'atomes fixes entourent les atomes mobiles
(c) et (d), cinq couches d'atomes fixes entourent les atomes mobiles
Le premier atome frappé a une énergie cinétique initiale de 40 eV
(a) et (c), il fait dans le plan $[001]$ un angle de 22,5 degrés avec la direction $\langle 100 \rangle$
(b) et (d), il fait dans le plan $[001]$ un angle de 15 degrés avec la direction $\langle 100 \rangle$

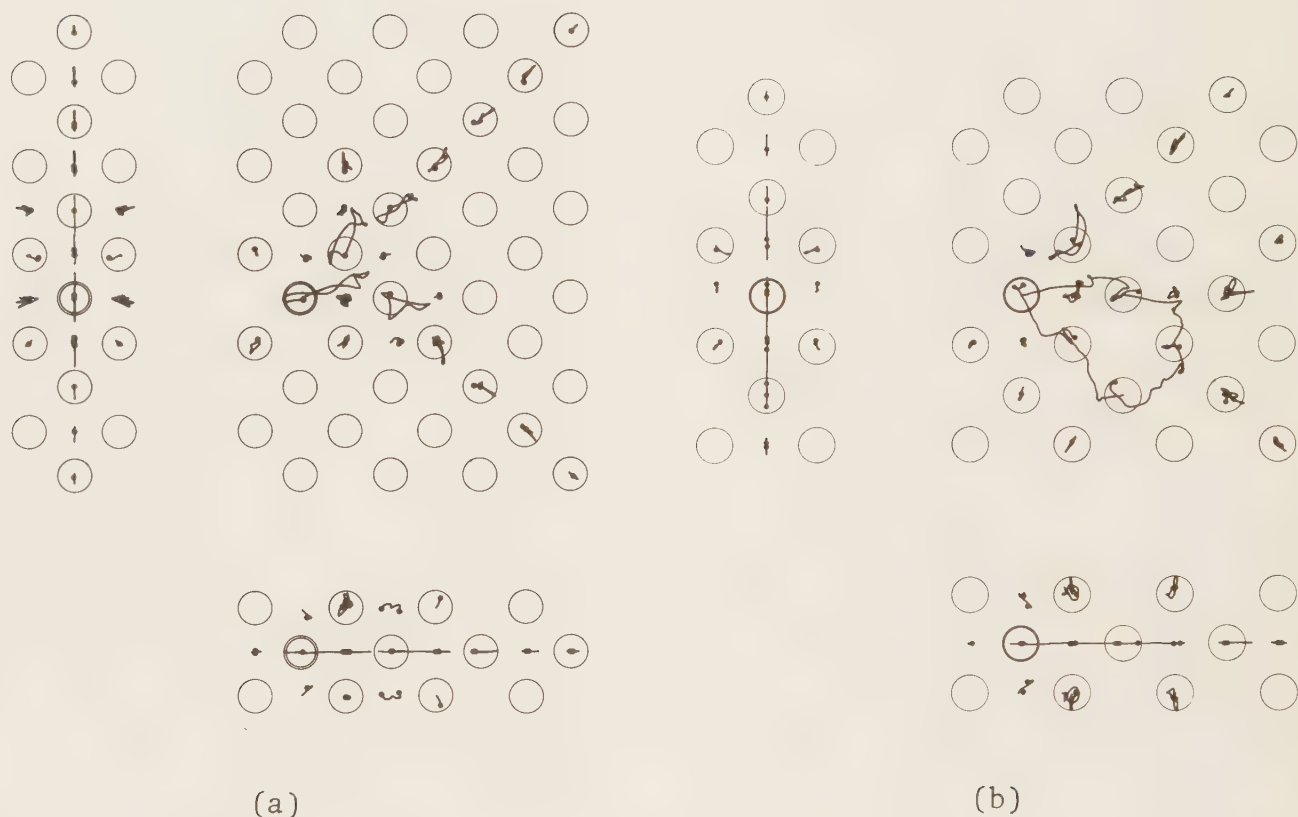


Figure IV-7
Simulations numériques avec le modèle ANGIANG
Trajectoires des atomes énergiques de la cascade
Les cercles représentent les sites des atomes du plan du premier atome frappé. La position du premier atome frappé est indiquée par deux cercles concentriques. Les gros points indiquent les positions finales des atomes énergiques. Les calculs sont arrêtés quand aucun atome n'a une énergie cinétique supérieure à un électron-volt. Cinq couches d'atomes fixes entourent les atomes mobiles. Le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle MOL1 (cf. annexe I)
A gauche, projection sur le plan $\begin{bmatrix} 100 \end{bmatrix}$
A droite, projection sur le plan $\begin{bmatrix} 001 \end{bmatrix}$
En bas, projection sur le plan $\begin{bmatrix} 010 \end{bmatrix}$
Le solide étudié est un monocristal de cuivre supposé en réseau statique
Le premier atome frappé a une énergie cinétique initiale de 40 eV
(a) Il fait dans le plan $\begin{bmatrix} 001 \end{bmatrix}$ un angle de 22,5 degrés avec la direction $\langle 100 \rangle$
(b) Il fait dans le plan $\begin{bmatrix} 001 \end{bmatrix}$ un angle de 15 degrés avec la direction $\langle 100 \rangle$

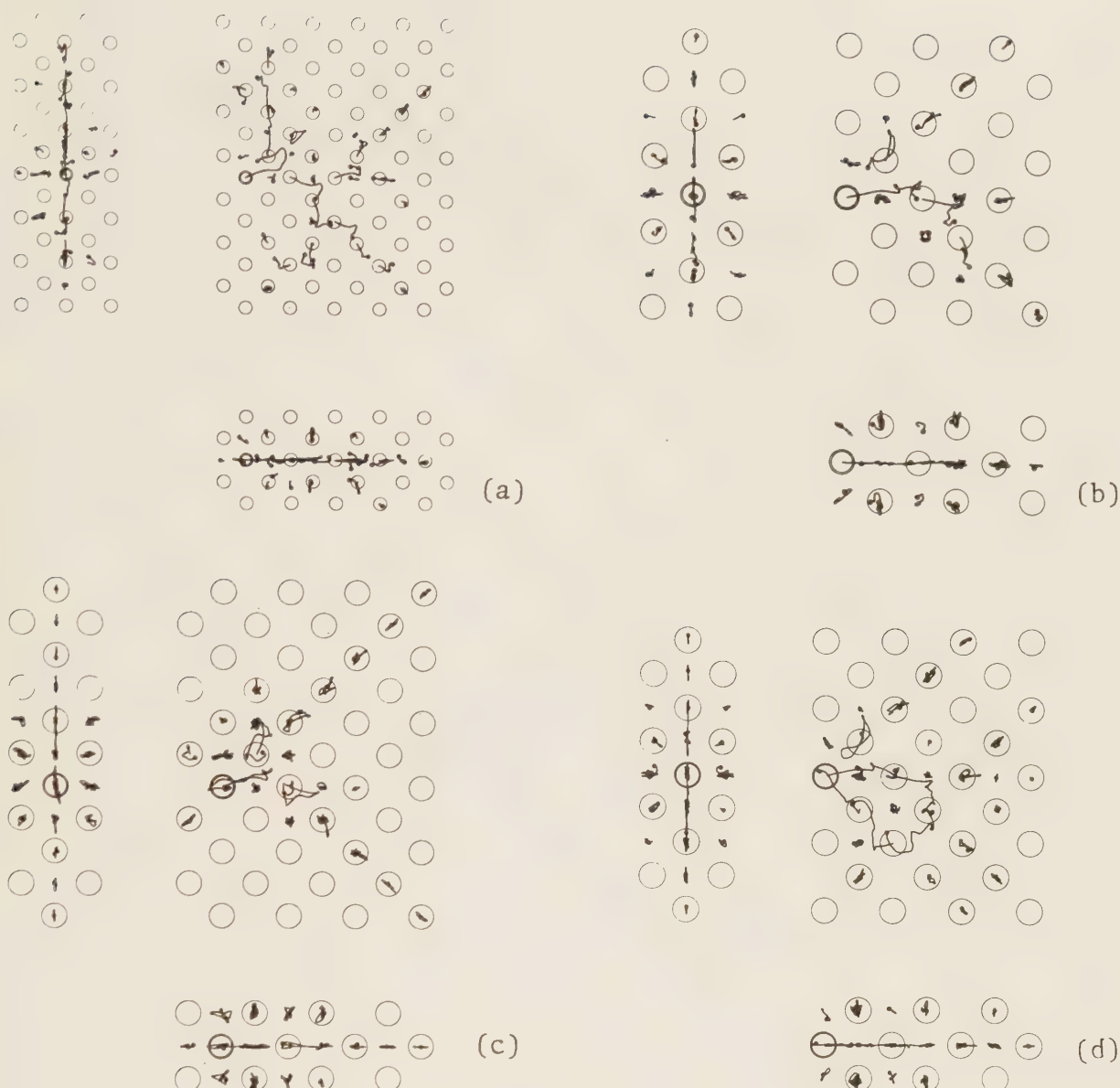


Figure IV-8

Simulations numériques avec le modèle ANGIANG

Trajectoires des atomes énergiques de la cascade

Les cercles représentent les sites des atomes du plan du premier atome frappé. La position du premier atome frappé est indiquée par deux cercles concentriques. Les gros points indiquent les positions finales des atomes énergiques. Les calculs sont arrêtés quand aucun atome n'a une énergie cinétique supérieure à un électron-volt. Cinq

couches d'atomes fixes entourent les atomes mobiles

A gauche, projection sur le plan $\{100\}$

A droite, projection sur le plan $\{001\}$

En bas, projection sur le plan $\{010\}$

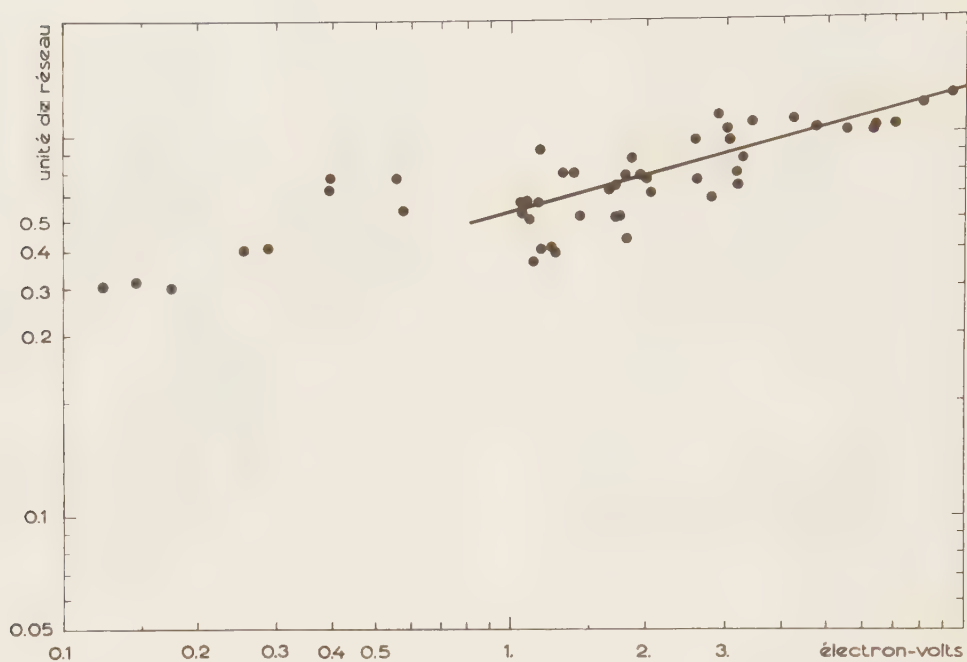
Le solide étudié est un monocristal de cuivre supposé vibrant à 15 K

(a) et (b), le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB2 (cf. annexe I)

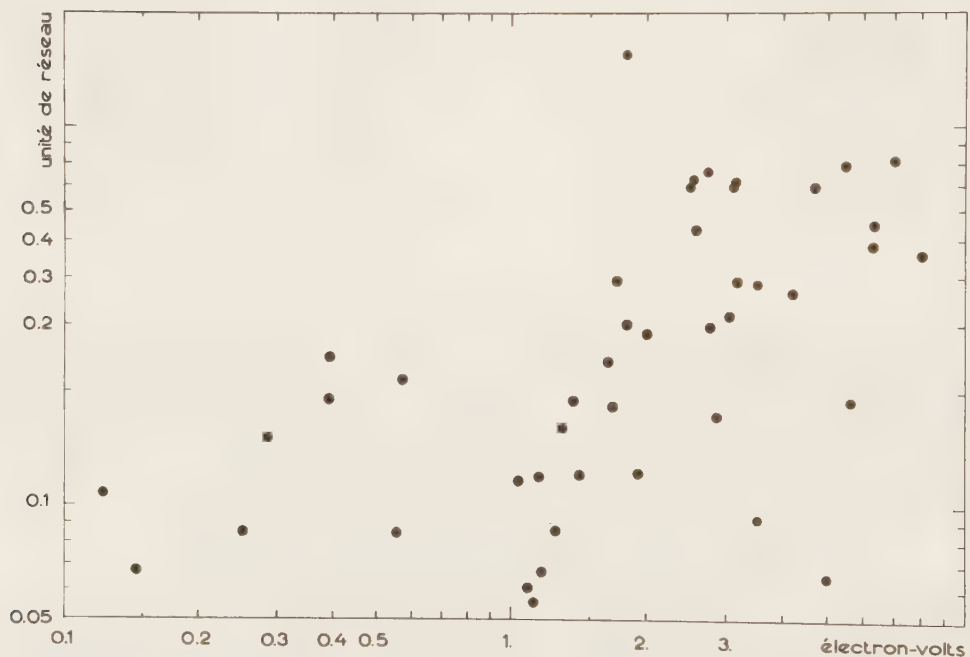
(c) et (d), le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle MOL1 (cf. annexe I)

Le premier atome frappé a une énergie cinétique initiale de 40 eV
(a) et (c), il fait dans le plan $\{001\}$ un angle de 22,5 degrés avec la direction $\langle 100 \rangle$

(b) et (d), il fait dans le plan $\{001\}$ un angle de 15 degrés avec la direction $\langle 100 \rangle$



(a)



(b)

Figure IV-9

Parcours des atomes en fonction de l'énergie cinétique

(a) parcours linéaires

(b) distances parcourues

Le premier atome frappé a une impulsion initiale correspondant à 150 eV orientée par rapport au réseau cristallin dans une direction choisie au hasard

Le solide étudié est du cuivre supposé en réseau statique

Les calculs sont arrêtés à la date de 0.75×10^{-12} secondes

Cinq couches d'atomes fixes entourent les atomes mobiles

Le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB2 (cf. annexe I)

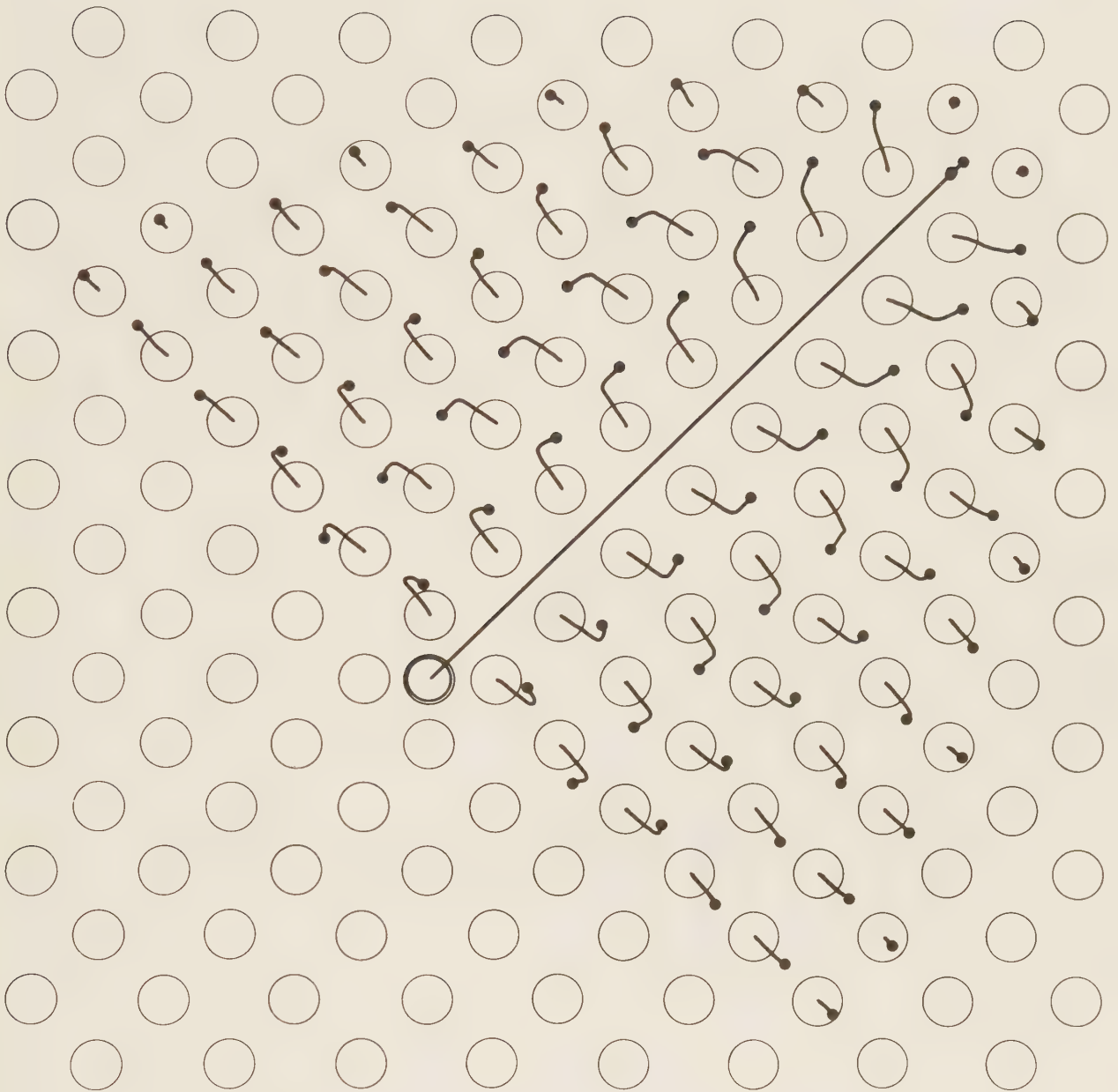


Figure IV-10

Simulation numérique avec le modèle ANGIANG

Trajectoires des atomes énergiques de la cascade

Les cercles représentent les sites des atomes du plan du premier atome frappé. La position du premier atome frappé est indiquée par deux cercles concentriques. Les gros points indiquent les positions finales des atomes énergiques. Les calculs sont arrêtés quand le premier atome frappé a une énergie cinétique inférieure à un électron-volt. Cinq couches d'atomes fixes entourent les atomes mobiles. Le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB2

(cf. annexe I)

Projection sur le plan $[001]$

Le solide étudié est un monocristal de cuivre supposé en réseau statique

Le premier atome frappé a une impulsion initiale correspondant à 150 eV. Il est canalisé dans la direction $\langle 110 \rangle$

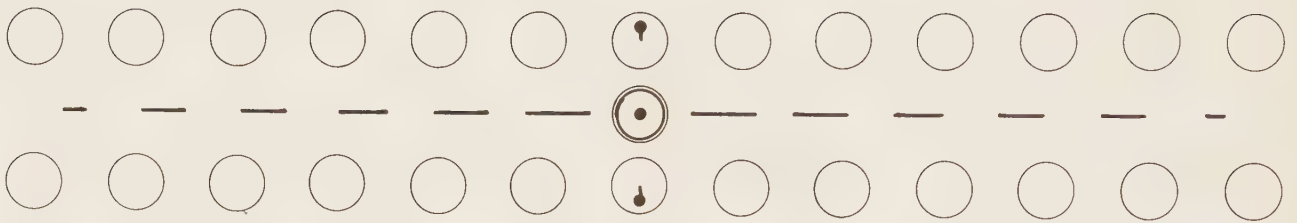


Figure IV-11
Projection sur le plan $[110]$ de la simulation décrite dans la
figure IV-10.

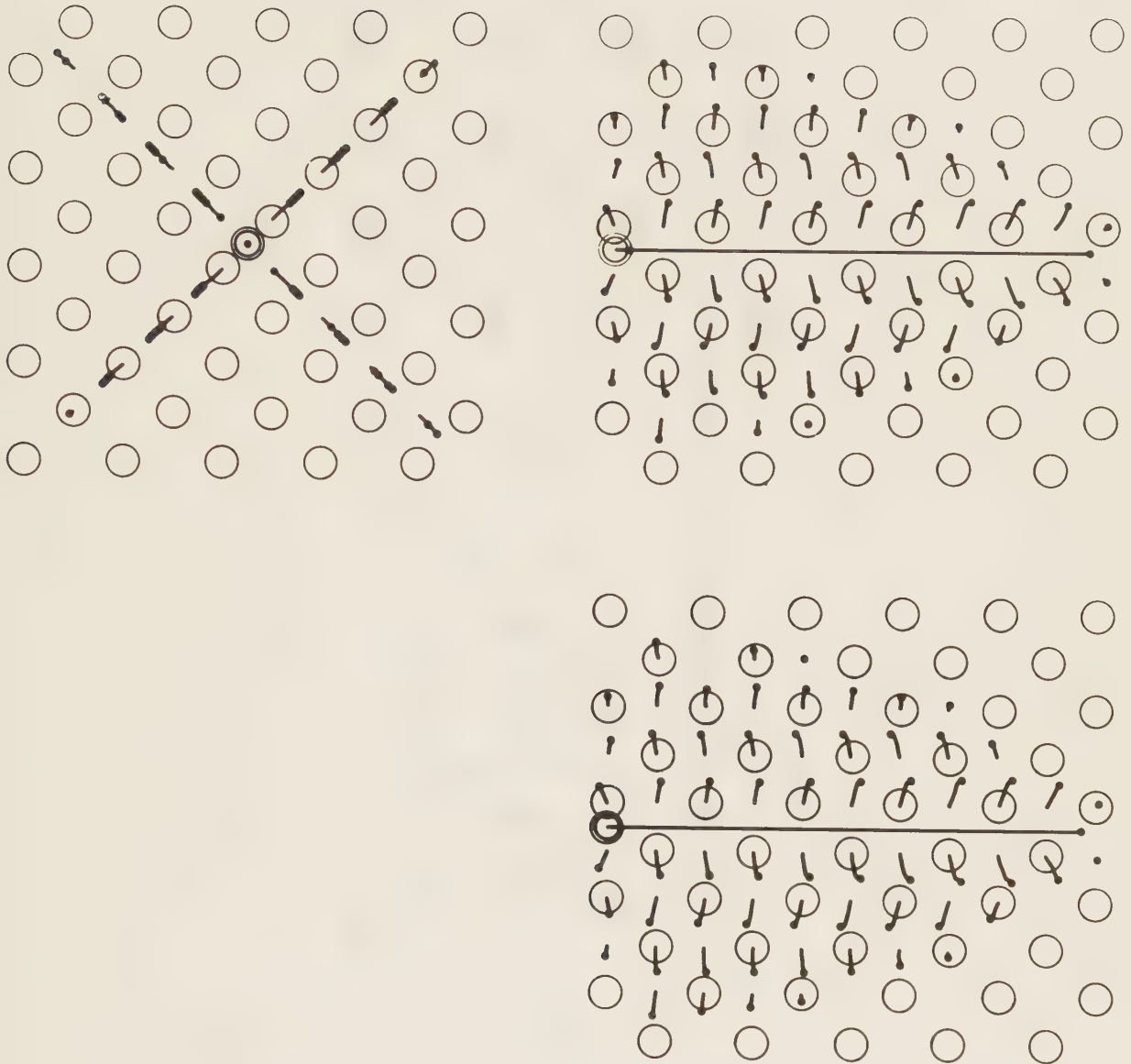


Figure IV-12

Simulation numérique avec le modèle ANGIANG

Trajectoires des atomes énergiques de la cascade

Les cercles représentent les sites des atomes du plan du premier atome frappé. La position du premier atome frappé est indiquée par deux cercles concentriques. Les gros points indiquent les positions finales des atomes énergiques. Les calculs sont arrêtés quand le premier atome frappé a une énergie cinétique inférieure à un électron-volt. Cinq couches d'atomes fixes entourent les atomes mobiles. Le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB2

(cf. annexe I)

A gauche, projection sur le plan $\{100\}$

A droite, projection sur le plan $\{001\}$

En bas, projection sur le plan $\{010\}$

Le solide étudié est un monocristal de cuivre supposé en réseau statique

Le premier atome frappé a une impulsion initiale correspondant à

150 eV. Il est canalisé dans la direction $\langle 100 \rangle$

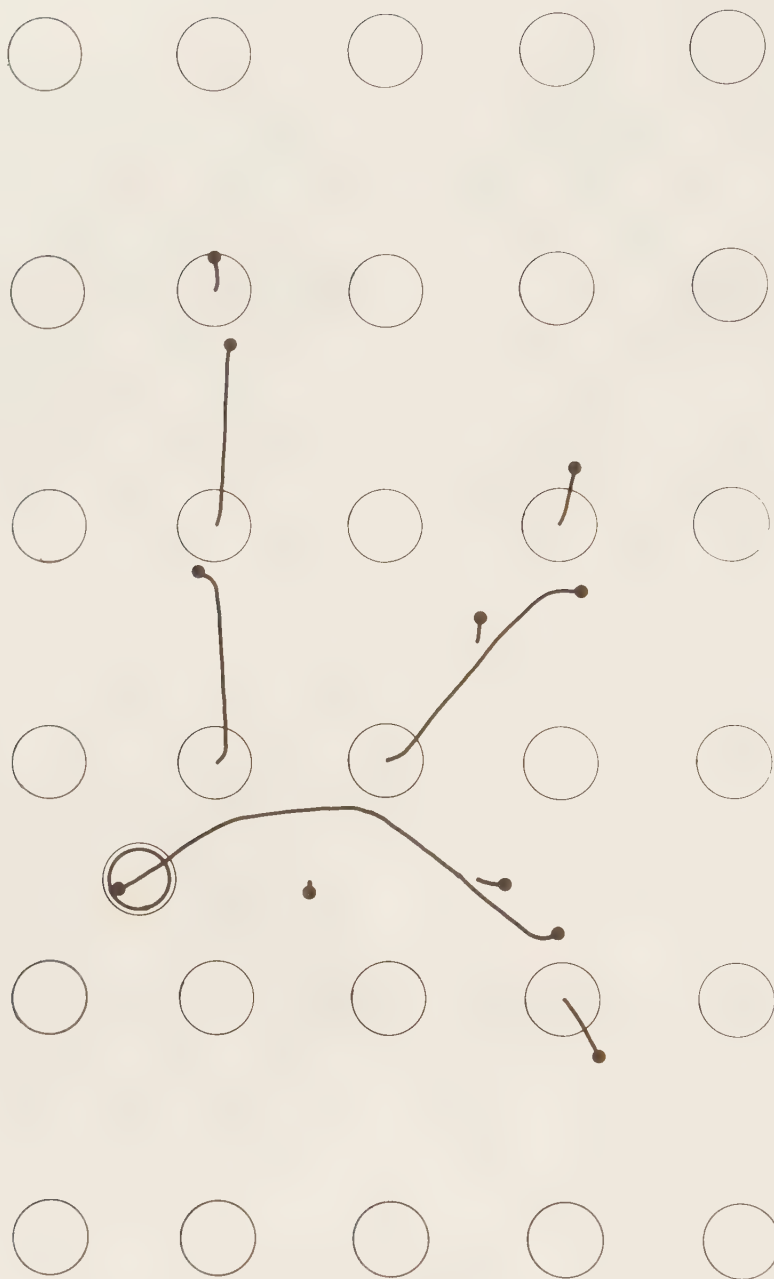


Figure IV-13

Simulation numérique avec le modèle ANGIANG

Trajectoires des atomes énergiques de la cascade

Les cercles représentent les sites des atomes du plan du premier atome frappé. La position du premier atome frappé est indiquée par deux cercles concentriques. Les gros points indiquent les positions finales des atomes énergiques. Les calculs sont arrêtés quand le premier atome frappé a une énergie cinétique inférieure à un électron-volt. Cinq couches d'atomes fixes entourent les atomes mobiles. Le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB2

(cf. annexe I)

Projection sur le plan $[1\bar{1}0]$

Le solide étudié est un monocristal de cuivre supposé en réseau statique

Le premier atome frappé a une impulsion initiale correspondant à

150 eV. Il est canalisé dans la direction $\langle 111 \rangle$

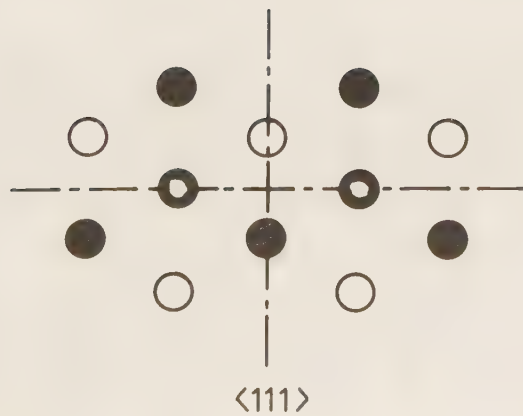
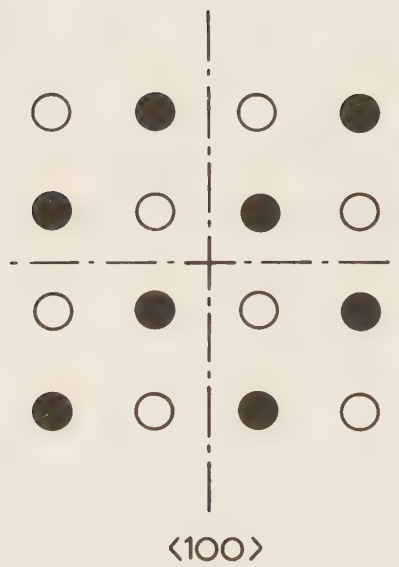
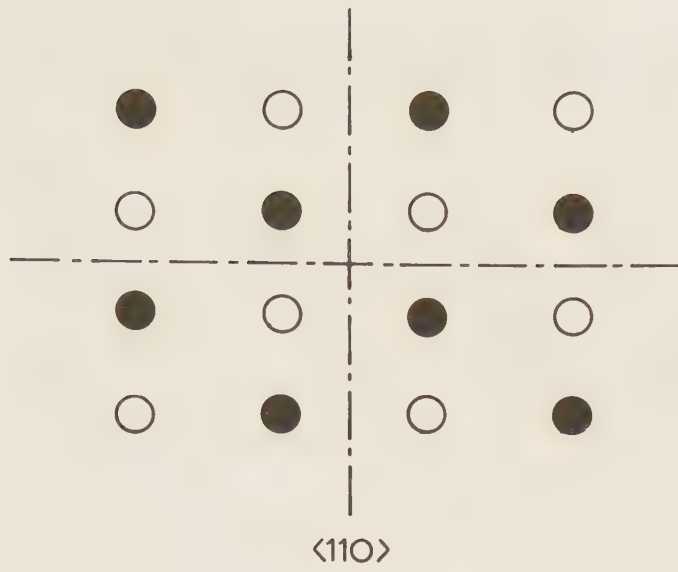


Figure IV-14

Principaux canaux dans un système cubique à faces centrées.

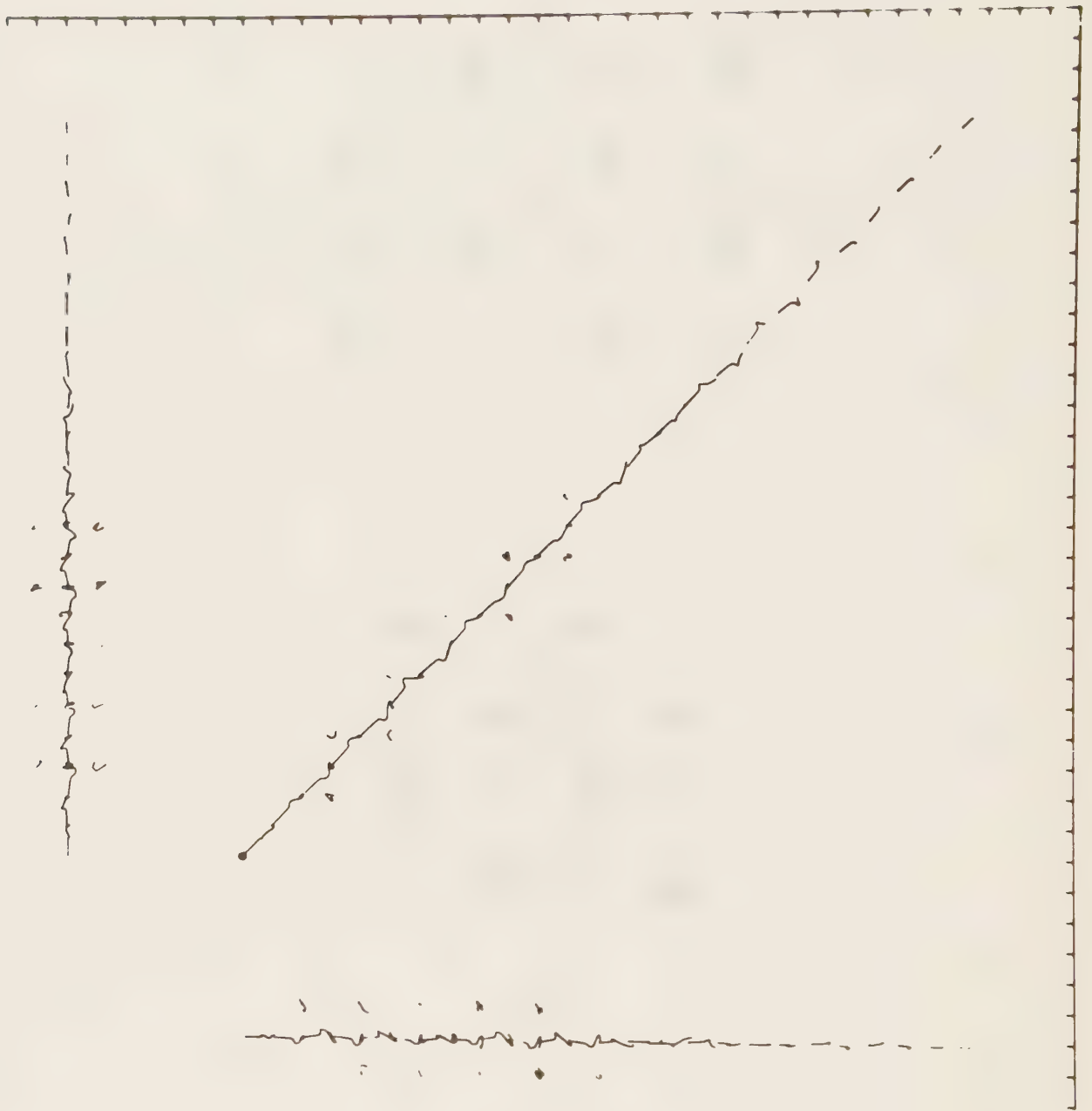


Figure IV-15

Simulation numérique avec le modèle ANGIANG

Trajectoire des atomes énergiques de la cascade

Les calculs sont arrêtés quand les atomes de la rangée $\langle 100 \rangle$ ont une énergie cinétique inférieure à un électron-volt. Cinq couches d'atomes fixes entourent les atomes mobiles. Le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB2 (cf. annexe I)

A gauche, projection sur le plan $\{100\}$

A droite, projection sur le plan $\{001\}$

En bas, projection sur le plan $\{010\}$

Le solide étudié est un monocristal de cuivre supposé en réseau statique
Le premier atome frappé a une impulsion initiale correspondant à 30 eV orientée dans une direction proche de la direction $\langle 100 \rangle$



Figure IV-16

Simulations numériques avec le modèle ANGIANG

Trajectoires des atomes énergiques de la cascade

Les cercles représentent les sites des atomes du plan du premier atome frappé. La position du premier atome frappé est indiquée par deux cercles concentriques. Les gros points indiquent les positions finales des atomes énergiques. Les calculs sont arrêtés quand aucun atome de la rangée $\langle 100 \rangle$ n'a une énergie cinétique supérieure à un électron-volt. Cinq couches d'atomes fixes entourent les atomes mobiles. Le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB2 (cf. annexe I)

A gauche, projection sur le plan $[100]$

A droite, projection sur le plan $[001]$

En bas, projection sur le plan $[010]$

Le solide étudié est un monocristal de cuivre supposé en réseau statique
Le premier atome frappé a une impulsion initiale correspondant à 30 eV orientée dans une direction proche de la direction 100

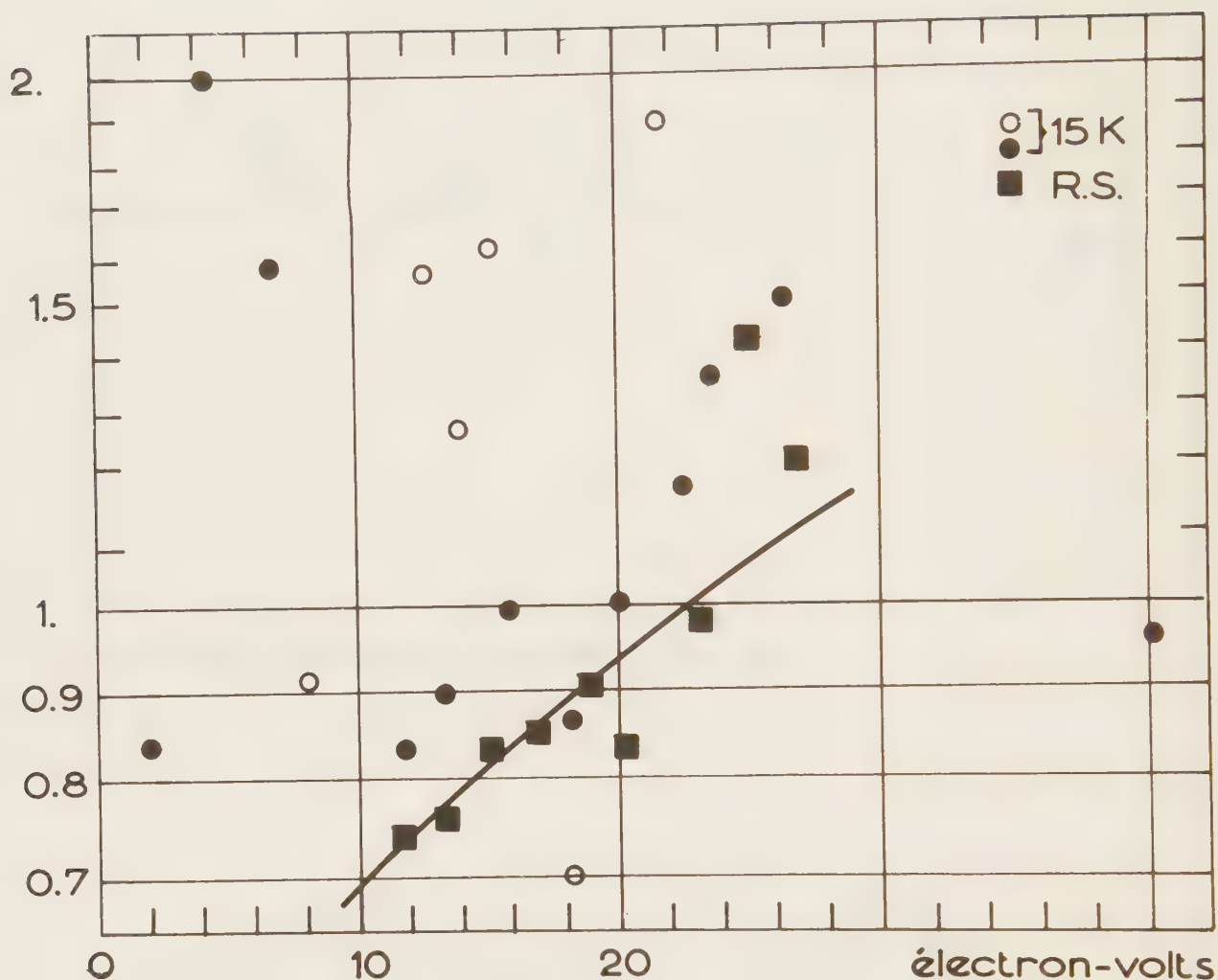


Figure IV-17

Facteur de focalisation de la rangée $\langle 110 \rangle$ en fonction de l'énergie
 Les calculs sont arrêtés quand aucun atome de la rangée $\langle 110 \rangle$ n'a
 une énergie supérieure à un électron-volt. Cinq couches d'atomes
 fixes entourent les atomes mobiles. Le modèle de potentiel
 interatomique utilisé est le modèle GIB2 (cf. annexe I)
 Le solide étudié est un monocristal de cuivre supposé en réseau statique
 Le premier atome frappé a une impulsion initiale correspondant à 40 eV
 orientée dans une direction proche de la direction $\langle 110 \rangle$

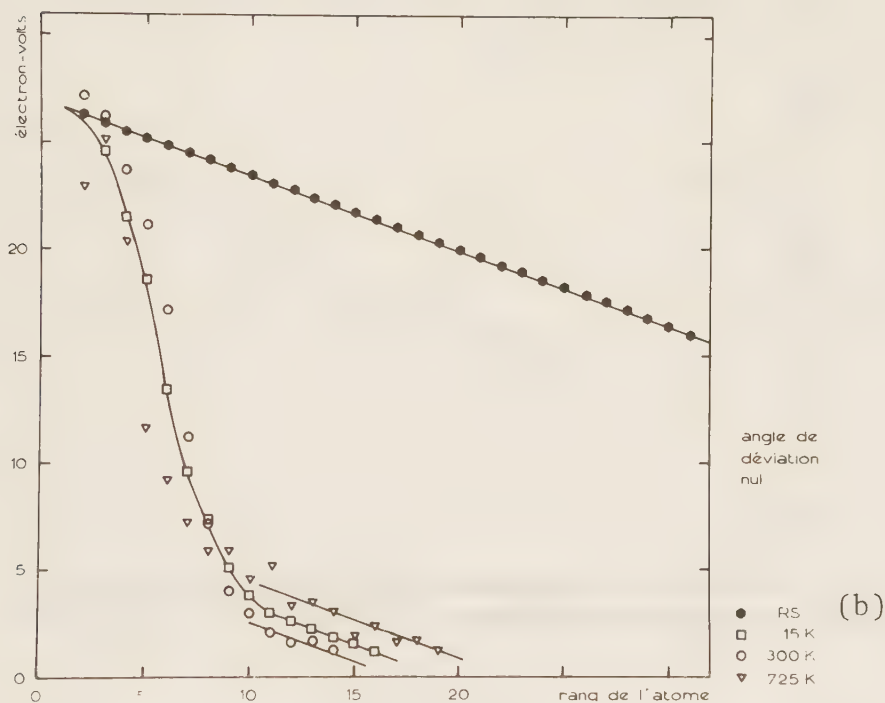
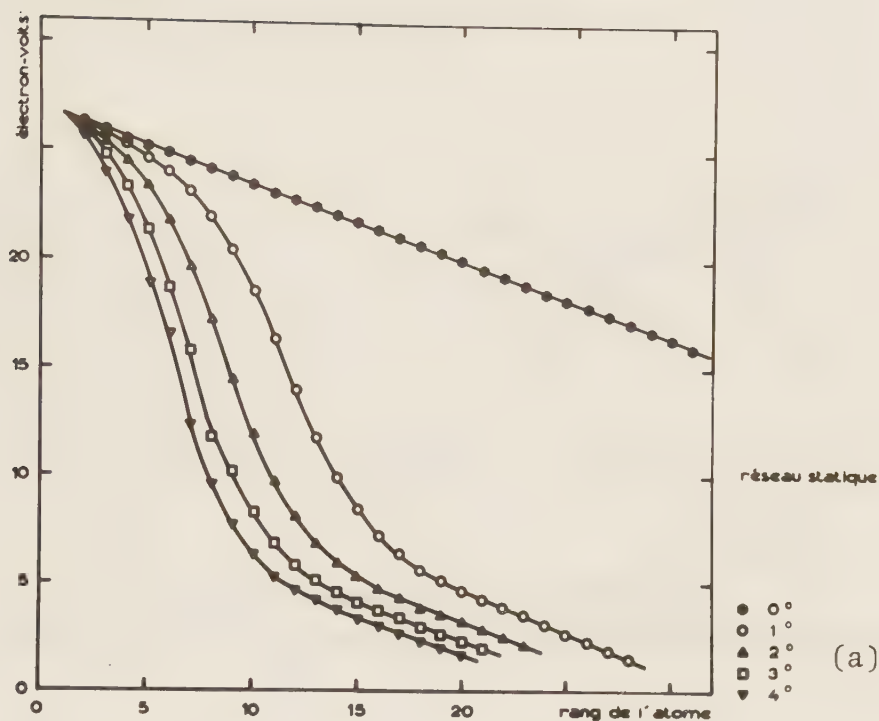


Figure IV-18

Focalisation dans la direction $\langle 110 \rangle$

Energie des atomes de la rangée de focalisation

Les calculs sont arrêtés quand aucun atome n'a une énergie supérieure à un électron-volt. Cinq couches d'atomes fixes entourent les atomes mobiles. Le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB2 (cf. annexe I)

Le solide étudié est un monocristal de cuivre

(a) Le réseau est supposé statique

(b) L'angle de déviation est nul

Le premier atome frappé a une impulsion initiale correspondant à 30 eV

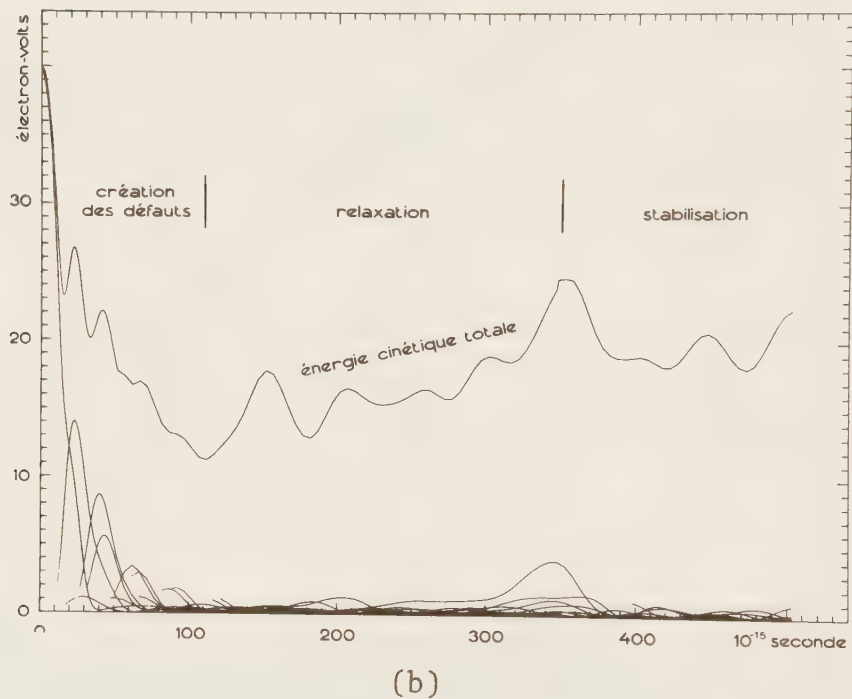
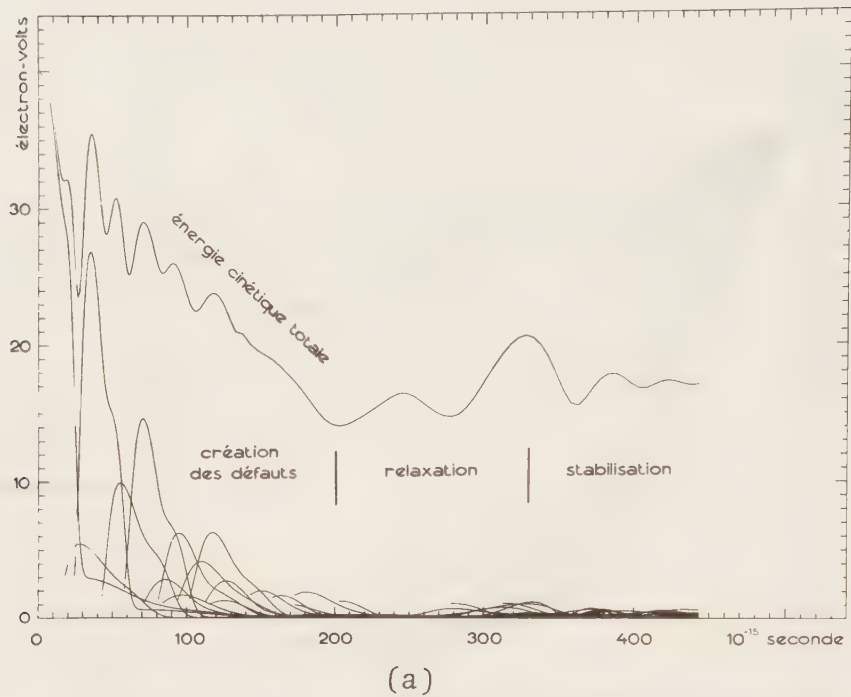


Figure IV-19

Simulations numériques avec le modèle ANGIANG
Evolution des énergies cinétiques

Les calculs sont arrêtés quand aucun atome n'a une énergie supérieure à un électron-volt. Cinq couches d'atomes fixes entourent les atomes mobiles. Le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB2 (cf. annexe I)

Le solide étudié est un monocristal de cuivre supposé en réseau statique

Le premier atome frappé a une impulsion initiale correspondant à 40 eV parallèle au plan $[001]$ et faisant avec la direction $\langle 100 \rangle$

- (a) un angle de 22,5 degrés
- (b) un angle de 15 degrés

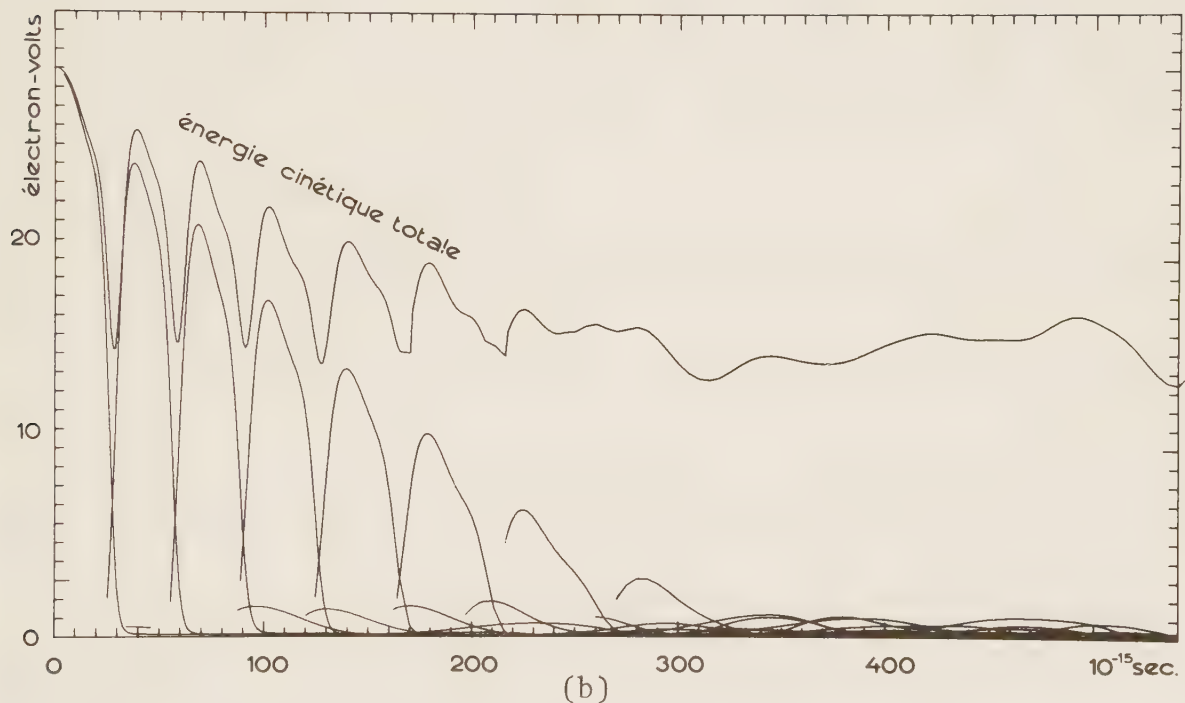
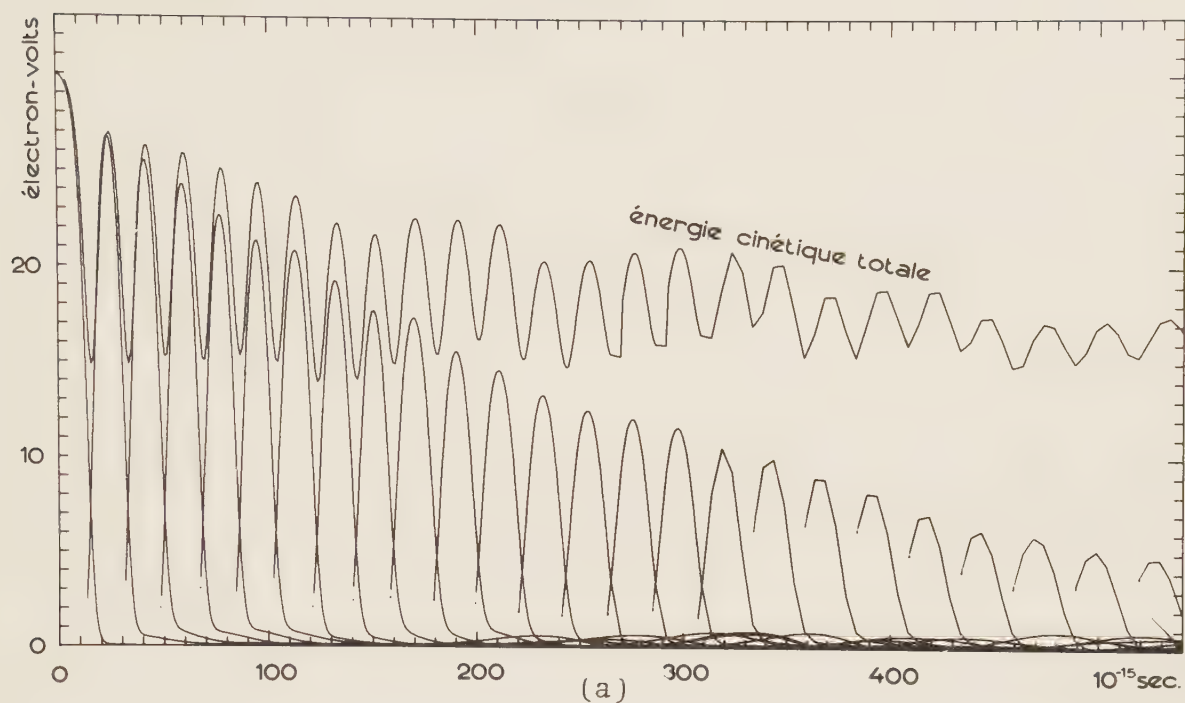


Figure IV-20

Simulations numériques avec le modèle ANGIANG

Evolution des énergies cinétiques en cas de focalisation

Les calculs sont arrêtés quand aucun atome de la rangée de focalisation n'a une énergie supérieure à un électron-volt. Cinq couches

d'atomes fixes entourent les atomes mobiles. Le modèle de potentiel interatomique utilisé est le modèle GIB2 (cf. annexe I). Le solide étudié est un monocristal de cuivre supposé en réseau statique

Le premier atome frappé a une impulsion initiale correspondant à 30 eV orientée dans une direction proche de :

- (a) la direction $\langle 110 \rangle$
- (b) la direction $\langle 100 \rangle$

Chapitre V

SIMULATIONS NUMERIQUES AVEC LE MODELE DE COLLISIONS BINAIRES

Comme nous pouvons le constater au chapitre précédent, la majeure partie des défauts créés sont créés par des atomes qui ont une énergie importante. Nous pouvons donc, pour simuler numériquement la création de la cascade, utiliser le modèle de collisions binaires.

Plusieurs paramètres n'ont pu être précisés avec le modèle d'interactions multiples. Nous commençons donc par étudier par analyse factorielle l'influence des données que nous introduisons dans le modèle (paragraphe I). Ensuite nous étudions le parcours d'un projectile dans le solide (paragraphe II) puis la création des défauts (paragraphe III). Comme au chapitre précédent, nous ne cherchons pas à déterminer les valeurs numériques qui caractérisent un effet d'irradiation, mais à proposer des théories de l'effet d'irradiation qui nous semblent les plus plausibles au vu des résultats de nos simulations.

I - INFLUENCE DES DONNEES DU MODELE.

Les données du modèle MARLOWE se répartissent en deux grands groupes :

- les données relatives aux hypothèses que nous admettons implicitement en utilisant le modèle,
- les données relatives aux conditions physiques que nous voulons simuler numériquement.

Du premier groupe de données, nous avons discuté de l'influence des énergies de coupure que nous avons trouvé négligeable au chapitre IV. Mais avant de connaître les influences des divers paramètres du modèle il faut commencer par savoir par rapport à quelle population de référence il faut comparer les résultats.

Nous simulons des cascades dont le premier atome frappé reçoit une énergie à partir d'un neutron rapide. Nous avons dit au chapitre II que dans ce cas-là les directions de l'impulsion initiale des premiers atomes frappés sont réparties d'une façon isotrope par rapport au réseau cristallin. Nous devons donc tirer au hasard la direction de l'impulsion initiale du premier atome frappé de chaque cascade.

A part l'étude de l'influence de la nature du solide, notre étude ne concerne que le cuivre cubique à faces centrées. Nous pensons que les conclusions que nous en tirons restent valables pour d'autres solides.

Les conclusions que nous en tirons ont une grande vraisemblance parce que nous étudions sur les projections sur les trois premiers plans principaux et que la

somme des inerties de ces trois plans oscille entre 60 et 90 pour cent de l'inertie totale, ce qui veut dire que ces trois plans nous donnent entre 60 et 90 pour cent des informations.

Nous allons d'abord étudier la population de cascades qui sert de référence (paragraphe 1.1), ensuite nous étudions les influences des données provenant des hypothèses (paragraphe 1.2) et de la physique du problème (paragraphe 1.3).

1.1 - La population de référence.

Le choix de la population de référence (paragraphe 1.1.1) revêt une importance capitale parce que d'un bon choix dépend la possibilité de faire à moindre frais les comparaisons avec les populations dont un des paramètres est différent. L'analyse des résultats de la simulation numérique de la population de référence (paragraphe 1.1.2) permet de faire des regroupements de paramètres. Mais il faut aussi s'assurer que ces résultats ne dépendent pas trop de la série de nombre pseudo-aléatoires obtenus (paragraphe 1.1.3).

1.1.1 - Choix de la population de référence.

Comme pour toute étude statistique, le problème principal est celui du choix de la population de référence. En principe, nous devrions choisir les hypothèses que nous pensons être les plus réalistes possibles, c'est-à-dire :

(a) le modèle de potentiel interatomique sera le modèle de MOLIERE avec un rayon d'écrantage égal à $0.0738 \text{ \AA} \left[41 \right]$ (annexe I),

(b) le modèle de frottement électronique sera celui de FIRSOV $\left[57 \right]$,

(c) les énergies seuil de déplacements et de coupure seront égales à une vingtaine d'électron-volts.

Nous devons choisir également les conditions physiques les plus proches du problème technologique que nous devons étudier, c'est-à-dire une irradiation dans un réacteur à neutrons rapides :

(d) le premier atome frappé sera un atome du solide qui quitte son site avec une énergie supérieure à une dizaine de kilo-électron-volts et dans une direction choisie au hasard par rapport au réseau cristallin,

(e) les atomes du solide devront vibrer avec une amplitude correspondant à la température dans le coeur du réacteur, c'est-à-dire entre 750 et 900 K.

Mais une population de référence doit aussi satisfaire à trois critères pratiques contradictoires :

(a) elle doit être assez nombreuse pour qu'une étude statistique soit valable,

(b) elle ne doit pas coûter trop cher à obtenir,

(c) elle doit fournir tous les paramètres statistiquement significatifs et qui peuvent être comparés à ceux des autres populations auxquelles on la compare.

Pour satisfaire à un compromis de ces trois critères, nous devons renoncer à une population en tout point idéale à celle que nous avons décrite plus haut. Pour réduire le temps de calcul, nous prendrons des premiers atomes frappés d'énergie cinétique initiale égale à 500 eV seulement. Avec cette énergie, le nombre de déplacements atomiques risque, d'après la formule de KINCHIN et PEASE $\left[71 \right]$ d'être faible et l'on ne pourrait pas étudier valablement les phénomènes rares comme les séquences de remplacements. Nous pouvons augmenter la fréquence de ces phénomènes rares en supposant le solide en réseau statique et en prenant comme énergie seuil de déplacements et de coupure une énergie égale à 2.5 eV. Nous pensons qu'avec de

tels paramètres nous pouvons prendre une population de référence d'une cinquantaine de simulations.

Les caractéristiques de notre population de référence sont résumées au tableau V.1.

1.1.2 - Analyse des résultats.

Nous trouvons que le sous-espace de dimension 4 concentre 71.7 pour cent des informations. Ce qui veut dire que les conclusions en examinant les projections des vecteurs représentant les cascades sur les trois premiers plans principaux (figures V-1 et V-2) sont plus que probables.

Pratiquement tous les points se projettent à l'intérieur des projections de l'ellipsoïde d'inertie. La population de référence nous semble donc assez importante pour que la suite de notre étude statistique sur cette population ou en comparaison avec cette population soit significative. Certaines projections des vecteurs représentant les paramètres se regroupent en trois ensembles que nous pouvons penser représenter

- le parcours du premier atome frappé,
- les déplacements atomiques,
- la répartition spatiale des défauts.

Nous donnons au tableau V.2 la liste des paramètres de chaque groupe. Nous ne pensons pas pouvoir regrouper les autres paramètres d'une façon valable.

Les paramètres "nombre de lacunes créées" (numéro 3) et "nombre de lacunes restantes après recombinaison immédiate de rayon 0.25 unité de réseau" se projettent sur tous les plans au même point. Un examen de leur valeur respective pour chaque cascade montre que ces deux paramètres sont égaux à quelques exceptions près. Nous pensons donc que les atomes qui ont une énergie supérieure à l'énergie seuil de déplacements se déplacent sur une distance supérieure à 0.25 unité de réseau.

Les paires de FRENKEL dont la distance lacune-interstitiel est inférieure à 1.75 unité de réseau caractérisent la répartition spatiale des défauts. Les paires de FRENKEL plus espacées semblent être créées en fonction des conditions initiales du processus de déplacements atomiques et caractérisent donc ce processus.

1.1.3 - Stabilité de la population de référence.

Nous voulons savoir si le fait d'avoir une population aussi homogène ne provient pas du mode de tirage Monte-Carlo. En effet les nombres pseudo-aléatoires utilisés sont calculés à partir d'un nombre initial recopié d'une table de nombres au hasard. Il y a un doute sur la nature aléatoire d'une telle série de nombres.

Aussi, pour être certain que les résultats globaux que nous avons obtenus au paragraphe précédent ne dépendent pas du nombre au hasard choisi à l'origine des calculs, nous avons créés une deuxième population de 50 cascades identiquement comme la première population mais avec un autre nombre au hasard initial. Nous avons trouvé (figure V-3) que les projections sur les trois premiers plans principaux des ellipsoïdes d'inertie des deux populations se recouvrent. Nous pouvons donc affirmer que les conclusions que nous avons tirées ne dépendent pas du nombre au hasard initial (tableau V.3).

1.2 - Influence des hypothèses du modèle.

Nous avons trouvé au chapitre IV que l'énergie de coupure n'a pas grande influence sur les résultats de la simulation. Dans ce paragraphe, nous allons étudier par analyse factorielle l'influence des autres hypothèses du modèle MARLOWE, c'est-à-dire le modèle de potentiel interatomique (paragraphe 1.1.1), le modèle de frottements électroniques (paragraphe 1.1.2) et l'énergie seuil de déplacements (paragraphe 1.1.3). Nous verrons que ces hypothèses ont une très grande influence sur les résultats.

1.2.1 - Influence du modèle de potentiel interatomique.

Un modèle de potentiel interatomique peut représenter un atome comme une sphère plus ou moins dure. La "dureté" de l'atome est fonction décroissante du rayon d'écrantage du potentiel. Pour connaître l'influence du modèle de potentiel, il nous suffit donc de changer le rayon d'écrantage du modèle de potentiel de MOLIERE [116] que nous utilisons dans le modèle MARLOWE.

Nous avons simulé sept populations de cinquante cascades chacune. Ces populations ne diffèrent de la population de référence du paragraphe 1.1 que par le rayon d'écrantage du modèle de potentiel. Ces rayons d'écrantage sont : 0.0364 Å, 0.0492 Å, 0.0738 Å, 0.0834 Å, 0.0960 Å, 0.1476 Å et 0.1668 Å.

Les projections des ellipsoïdes d'inertie des populations de cascades sur les trois premiers plans principaux (figure V-4) montrent que ces ellipsoïdes sont très allongés et espacés l'une de l'autre. Les ellipsoïdes ont deux directions dans l'espace euclidien $\mathbb{R}^3$, l'une commune aux ellipsoïdes d'inertie des populations de faibles rayons d'écrantage, l'autre commune aux ellipsoïdes d'inertie des populations de rayons d'écrantage importants. L'ellipsoïde de la population de référence semble n'appartenir à aucun des deux groupes. Nous pouvons déjà conclure qu'une variation du rayon d'écrantage fait varier des groupes de paramètres différents selon que ce rayon d'écrantage est grand ou petit.

Les projections sur les mêmes plans des vecteurs représentant les paramètres (figure V-5), montrent qu'il y a opposition entre les paramètres caractérisant les déplacements atomiques (à droite) et ceux caractérisant la répartition spatiale des défauts et le parcours du premier atome frappé (à gauche). Ce qui veut dire que si nous changeons le rayon d'écrantage de façon à augmenter les paramètres caractérisant les déplacements atomiques, nous diminuons ceux caractérisant la répartition spatiale des défauts.

Nous constatons que les projections des populations de faibles rayons d'écrantage se situent du même côté que celles des paramètres caractérisant les déplacements atomiques et que les projections des populations de grands rayons d'écrantage se situent du même côté que celles des paramètres caractérisant la répartition spatiale des défauts. Nous en concluons que si nous augmentons le rayon d'écrantage, nous diminuons les paramètres caractérisant la répartition spatiale des défauts et nous augmentons ceux caractérisant les déplacements atomiques. C'est ce que nous voyons globalement au tableau V.4, car nous avons le résultat inverse si nous comparons les moyennes des paramètres des populations de rayon d'écrantage 0.0364 Å et 0.0492 Å, pour ce qui concerne le déplacement atomique. Ce résultat nous permet de proposer le modèle suivant :

- Si les atomes sont trop petits (faibles rayons d'écrantage) ils peuvent se fau-
filer entre les atomes du solide en en déplaçant un petit nombre seulement ;

- Si les atomes sont gros (grands rayons d'écrantage) ils agissent simultanément
sur un grand nombre d'atomes du solide qu'ils déplacent assez près de leur site
initial.

De ce modèle, nous tirons la conclusion que les atomes les plus gros (et
par forcément les atomes les plus lourds) créent plus de dommage que les petits ato-
mes.

1.2.2 - Influence du modèle de frottements électroniques.

Nous' savons que le modèle de frottements électroniques de FIRSOV [57] a
la forme

$$\Delta E = \frac{\alpha}{(1 + \beta s)^5} \quad (V.1)$$

α et β = constantes dépendant des masses et des charges des particules en collision
 s = paramètre d'impact

α est proportionnel à la vitesse du projectile.

La caractéristique de ce modèle est de dépendre du paramètre d'impact. Pour étudier
l'influence du modèle, nous pourrions changer les valeurs de α ou de β , mais nous
trouvons plus intéressant de modifier l'exposant m du dénominateur de

$$\Delta E = \frac{\alpha}{(1 + \beta s)^m} \quad (V.2)$$

parce que c'est cet exposant qui commande le mélange d'électrons des deux particules
en collision [57].

Nous avons donc simulé cinq populations de cascades correspondant à l'ex-
posant 3, 4, 5, 6 et 7.

Les projections des ellipsoïdes d'inertie des populations de cascades sur
les trois premiers plans principaux (figure V-6) montrent que celles-ci sont ali-
gnées suivant la première direction propre. Plus la valeur de l'exposant est faible,
plus les ellipsoïdes d'inertie sont éloignés. Les ellipsoïdes d'inertie des popula-
tions de cascades d'exposants 6 et 7 sont confondues. Nous pouvons donc conclure
que quand l'exposant est supérieur à 5 sa valeur exacte n'a pas grande importance
pour les résultats des simulations.

Les projections des vecteurs représentant les paramètres sur les trois
premiers plans principaux (figure V-7) ne nous apprennent rien d'autre que ce que
nous savons déjà : les différences entre les populations s'expriment surtout par la
création des défauts. Plus l'exposant est grand, moins il y a de frottements élec-
troniques, donc plus il y a d'énergie pour la création de défauts donc plus il y a
création de défauts (Tableau V.5).

Nous avons pensé que nous pourrions peut-être découvrir quelque chose
d'autre en éliminant l'effet des différences d'énergies perdues par frottements
électroniques. Pour cela, nous partons des résultats de NORGETT, ROBINSON et TORRENS
[35] et de la théorie de KINCHIN et PEASE [71] selon lesquels la création des dé-
fauts est proportionnelle à l'énergie disponible à cette création. Il nous suffit
donc de diviser tous les paramètres caractérisant la création des défauts (paramè-

mètres 1 à 5, 10 à 15 et 19 à 27) par l'énergie disponible, c'est-à-dire la différence entre l'énergie du premier atome frappé et celle perdue par frottements électroniques.

Les projections des ellipsoïdes d'inertie des populations avec ces nouveaux paramètres sur les trois premiers plans principaux (figure V-8) ont le même aspect que celles que nous avons vues avant la modification des paramètres : nous avons toujours le même alignement des ellipsoïdes d'inertie le long de la première direction propre et les mêmes proximités relatives de ces ellipsoïdes d'inertie.

1.2.3 - Influence de l'énergie seuil de déplacements.

Nous avons pris des énergies seuils de déplacements égales à 2.5 eV, 5 eV, 10 eV, 20 eV, 30 eV, 40 eV et 50 eV, les autres paramètres restant identiques à ceux de la population de référence. Chaque population comporte 50 cascades. Nous avons trouvé que (figure V-9) les ellipsoïdes d'inertie des populations de cascades d'énergie seuil de déplacements égale à 2.5 eV, 5 eV et 10 eV sont très distants l'une de l'autre alors que les ellipsoïdes d'inertie des populations de cascades d'énergie seuil de déplacements égale à 20 eV, 30 eV, 40 eV et 50 eV sont très rapprochés. Nous en concluons que quand les énergies seuil de déplacements sont faibles, les cascades sont plus différentes quand on varie la valeur de l'énergie seuil de déplacements que quand ces énergies seuil de déplacements sont élevées. En d'autres termes, si nous choisissons une énergie seuil de déplacements supérieure à une vingtaine d'électron-volts il nous suffit de la choisir approximativement. Par contre, si nous choisissons une énergie seuil de déplacements faible il nous faut la déterminer avec précision. Nous voyons aussi que les centres de ces ellipsoïdes sont alignés le long de la première direction propre et que ces ellipsoïdes sont parallèles aux deuxième et troisième directions propres. Si nous regardons les projections des vecteurs représentant les paramètres (figure V-10) nous voyons que les vecteurs représentant la création des défauts se projettent sur la première direction propre et que les vecteurs représentant le parcours du premier atome frappé se projettent sur la deuxième direction propre. Ceci signifie que les populations d'énergies seuils de déplacements différentes se différencient par la création des défauts et que les cascades d'une même population se différencient par le parcours de leur premier atome frappé. Cette affirmation est confirmée si l'on regarde le tableau des moyennes des paramètres de chaque population (tableau V.6). Nous voyons que tous les paramètres caractérisant la création des défauts décroissent quand l'énergie seuil de déplacements augmente alors que les paramètres caractérisant le parcours du premier atome frappé ne varient pas d'une façon significative.

Nous avons pensé que, d'après KINCHIN et PEASE [71], le nombre de lacunes créées est inversement proportionnel à l'énergie seuil de déplacements et, que par conséquent, les autres paramètres caractérisant la création des défauts sont aussi inversement proportionnels à l'énergie seuil de déplacements. Nous avons alors l'idée de multiplier tous ces paramètres (paramètres 1 à 5, 10 à 15 et 19 à 27) par l'énergie seuil de déplacements afin de compenser les effets de celle-ci. Après avoir fait cette transformation nous avons refait l'analyse factorielle. Nous constatons (figure V-11) le même alignement des centres des ellipsoïdes d'inertie, mais dans l'ordre inverse. Les ellipsoïdes d'inertie des populations d'énergies seuils de déplacements égales à 2,5 eV et 5 eV sont isolés. Les autres se chevauchent.

En regardant les projections des vecteurs représentant les paramètres (figure V-12) nous constatons encore que les vecteurs représentant la création des défauts se projettent sur la première direction propre. Nous en concluons donc que la transformation de paramètres que nous avons effectuée ne change pas les conclusions que nous avons tirées auparavant. Le fait que l'ordre des ellipsoïdes s'inverse sur la première direction propre montre que la création des défauts est plus importante quand l'énergie seuil de déplacements augmente, pour un même rapport énergie du premier atome frappé sur énergie seuil de déplacements. Nous pouvons faire une vérification en multipliant les moyennes des lacunes créées par l'énergie seuil de déplacements.

Nous ne pensons pas pouvoir arriver intuitivement à cette conclusion. Nous avons ici un exemple de l'intérêt de l'analyse factorielle dans la recherche de conclusions imprévues.

1.3 - Influence des données physiques du problème.

Nous avons principalement trois données physiques autres que l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé : (a) la nature du solide (paragraphe 1.3.1 1.3.1), (b) la température (paragraphe 1.3.2) et (c) la structure cristalline du solide (paragraphe 1.3.3). En réalité, la question principale que nous nous sommes posé est la suivante : dans quelle mesure une cascade est modifiée par la structure cristalline ? En changeant le solide, nous changeons aussi la structure cristalline, en changeant la température nous modifions l'alignement des atomes qui est la caractéristique d'un état cristallin et en changeant l'orientation de l'impulsion initiale du premier atome frappé nous étudions l'importance de certaines rangées cristallines.

1.3.1 - Influence de la nature du solide.

Expérimentalement, on sait que les effets d'irradiation dépendent du solide irradié. Nous voulons vérifier si les résultats obtenus par le modèle MARLOWE dépendent ou non de la nature du solide.

Nous avons simulé six populations de cinquante cascades chacune, correspondant respectivement au fer, au cuivre, au molybdène, à l'argent, au tungstène et à l'or. Ces métaux ont été choisis parce que :

- trois sont à structure cubique centrée (fer, molybdène et tungstène) et trois sont à structure cubique à faces centrées (cuivre, argent et or),
- ils peuvent se regrouper en trois groupes de masse et de numéro atomiques différents, dans chaque groupe il y a un métal cubique centré et un métal cubique à faces centrées (fer et cuivre, molybdène et argent, tungstène et or).

Nous pensons que ce choix nous permet d'avoir une vue d'ensemble sur tous les métaux. Les caractéristiques des métaux étudiés sont données au tableau V.7.

Sauf pour le cuivre, dont nous avons conservé les caractéristiques de la population de référence afin de pouvoir faire des comparaisons ultérieures, nous avons utilisé le modèle de potentiel interatomique de MOLIERE [116] avec le rayon d'écrantage de FIRSOV [117] (le modèle MOL 1 de l'Annexe I). Nous avons utilisé ce modèle pour conserver l'homogénéité de la comparaison. En effet, un ajustement du rayon d'écrantage sur un modèle de potentiel plus réaliste nous donnerait un rayon d'écrantage qui n'est pas relié au numéro atomique des atomes et nous voulons justement pouvoir tenir compte du numéro atomique.

Les projections des ellipsoïdes d'inertie des populations de cascades sur les trois premiers plans principaux (figure V-13) montrent que :

- les ellipsoïdes d'inertie sont alignées suivant la première direction propre,
- les ellipsoïdes d'inertie des populations de cascades dans les métaux cubiques centrés sont du côté positif de la première direction propre et celles des cascades dans les métaux cubiques à faces centrées, du côté négatif,
- les ellipsoïdes d'inertie des populations de cascades dans les métaux cubiques à faces centrées sont plus regroupées que les autres.

Si nous regardons les projections des vecteurs représentant les paramètres sur les trois premiers plans principaux (figure V-14) nous constatons que les paramètres caractérisant la création des défauts ont leurs vecteurs représentatifs orientés vers le côté positif de la première direction propre. Nous pouvons donc conclure que :

- les différences se traduisent par la création de défauts comme dans toutes les études que nous avons menées dans ce paragraphe,
- il y a plus de création de défauts dans les métaux cubiques centrés que dans les solides cubiques à faces centrées,
- les résultats sont peu influencés par la nature du solide quand celui-ci est cubique à faces centrées, comparativement aux solides cubiques centrés.

D'après ces mêmes projections, nous avons constaté que les ellipsoïdes d'inertie sont allongées suivant la deuxième direction propre et que les paramètres caractérisant les parcours des premiers atomes frappés ont leurs vecteurs représentatifs orientés vers le côté négatif de la deuxième direction propre. Nous en déduisons que les cascades d'une même population se différencient par le parcours de leurs premiers atomes frappés.

En faisant abstraction du cuivre, pour lequel nous n'avons pas choisi le rayon d'écrantage que pour les autres solides, il nous semble que les ellipsoïdes d'inertie des populations de cascades dans les solides dont les atomes sont lourds sont du côté position de la troisième direction propre (figure V-13-b). En regardant la projection sur le deuxième plan principal des vecteurs représentant les paramètres (figure V-14), nous voyons que les paramètres caractérisant la répartition spatiale des défauts ont leurs vecteurs représentatifs orientés vers le côté positif de la troisième direction propre. Nous pouvons donc dire qu'il se crée relativement plus de défauts après recombinaison immédiate dans un solide dont les atomes sont lourds que dans un solide dont les atomes sont légers.

Nous pouvons donc conclure que (et ceci est confirmé par les chiffres du tableau V.8) :

- la création des défauts est plus importante dans les solides cubiques centrés que dans les solides cubiques à faces centrées,
- après recombinaison immédiate, il y a plus de défauts restants dans les solides dont les atomes sont lourds que dans ceux dont les atomes sont légers,
- dans un solide cubique à faces centrées, les effets d'irradiation sont peu influencés par la nature des atomes qui composent ce solide.

Comme pour l'analyse de l'influence de l'énergie seuil de déplacements, nous ne pensons pas que nous puissions arriver à ces conclusions sans l'aide de l'analyse factorielle.

1.3.2 - Influence de la température.

Nous savons que, quand la température augmente, l'amplitude de vibration augmente et le solide se rapproche de l'état amorphe. Nous devons donc nous attendre à une diminution des effets du réseau : rétrécissement de l'ellipsoïde d'inertie d'une population aux hautes températures dû à une moindre dispersion des résultats parce que ceux-ci sont moins conditionnés par l'orientation de l'impulsion initiale du premier atome frappé par rapport au réseau cristallin.

Nous avons simulé des populations de cinquante cascades chacune. Les populations ne diffèrent de la population de référence décrite au paragraphe 1.1 par le fait que le réseau cristallin est supposé vibrant aux températures de 15 K, 50 K, 100 K, 300 K et 725 K.

Les projections des ellipsoïdes d'inertie des populations de cascades sur les trois premiers plans principaux (figures V-15-a à V-15-c) montrent que ces ellipsoïdes sont vraisemblablement de même taille. Elles sont centrées pratiquement au même point. Nous pouvons donc en conclure que la température n'a pas d'influence sur les résultats de la cascade. En regardant les projections sur le plan principal formé par les troisième et quatrième directions propres, nous constatons que l'ellipsoïde de la population de référence, qui concerne des cascades dans un réseau supposé statique, est légèrement à l'écart des autres ellipsoïdes (figure V-15-d). Une population de cascades se différencie donc par le fait que les cascades sont créées dans un réseau supposé statique ou non et non par la température à laquelle correspond la vibration du réseau.

Les projections des vecteurs représentant les paramètres sur les trois premiers plans principaux et sur le plan principal formé par les troisième et quatrième directions propres (figure V-16) montrent que l'ellipsoïde s'écarte des autres ellipsoïdes d'inertie dans la direction des vecteurs représentant :

- le nombre de séquences de focalisation,
- l'énergie cinétique restante après l'arrêt des atomes énergiques,
- le nombre de lacunes créées,
- le nombre de lacunes restantes après recombinaison immédiate de rayon 0,25 unité de réseau.

La différence entre les cascades dans un réseau statique et les autres se caractérise par ces quatre paramètres. Nous avons trouvé au paragraphe 1.1.2 que les deux derniers paramètres sont pratiquement identiques, leur proximité ne nous étonne donc pas. Si nous examinons les valeurs moyennes des paramètres de chaque population (tableau V.9) nous constatons que le nombre de séquences de focalisation des cascades dans un réseau supposé statique est nettement supérieur à celui des autres cascades. Cette constatation peut s'expliquer par l'instabilité de la focalisation : dès qu'il y a vibration thermique, la focalisation disparaît, nous l'avons vu au chapitre IV et nous en aurons une autre preuve au paragraphe 3.3. La proximité des autres paramètres s'expliquent moins aisément. Nous pensons que la focalisation augmente le nombre d'atomes déplacés avec une petite énergie (ceux qui entourent la rangée de focalisation) donc augmente l'énergie cinétique restante après l'arrêt des atomes énergiques et le nombre de lacunes créées.

Comme dans les expériences d'irradiation on a toujours un réseau qui vibre, même si l'irradiation se fait à très basse température, nous pouvons donc conclure que la température du cristal irradié n'a aucune influence sur la création

des défauts. Nous parlons de création des défauts seulement parce qu'il est évident que le recuit de la cascade est fortement influencé par la température, mais ce problème est hors des limites de notre thèse.

Avant cette étude, nous nous sommes demandé si les résultats des simulations dépendent aussi de l'amplitude des vibrations atomiques, c'est-à-dire de la température, ou seulement de l'existence et de la non existence des vibrations atomiques. L'analyse factorielle nous permet de conclure : les résultats des simulations ne dépendent que de l'existence et de la non existence des vibrations atomiques.

1.3.3 - Influence de l'orientation de l'impulsion initiale du premier atome frappé.

Nous avons vu au paragraphe 1.3.1 que les résultats des simulations sont très influencés par la structure cristalline du solide et au paragraphe 1.3.2 que ces mêmes résultats ne dépendent plus de la température du solide dès que la répartition rigoureuse des atomes est perturbée par des vibrations thermiques. Nous nous sommes alors posé la question de savoir si, en choisissant une direction bien définie de l'impulsion initiale du premier atome frappé, nous avons une confirmation de ces résultats.

Nous avons donc simulé des cascades dont les premiers atomes frappés ont reçu une impulsion initiale dans les directions $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$, les trois directions les plus denses du réseau cubiques à faces centrées. Dans une première série de simulations, nous avons supposé le solide en réseau statique. Il nous a suffi de faire une seule simulation pour chacune de ces trois directions de l'impulsion initiale du premier atome frappé puisque dans ces simulations il n'y a pas de tirages de nombres au hasard. Dans une deuxième série de simulations, nous avons supposé le réseau vibrant à la température de 15 K. Pour chacune de ces directions, nous avons simulé dix cascades. Nous pensons que ce nombre de simulations est suffisant et le calcul des écarts-types des résultats nous a donné raison a posteriori (tableau V.10).

Nous avons trouvé que, dans un réseau statique, un atome qui a reçu une impulsion initiale dans les directions $\langle 110 \rangle$ ou $\langle 100 \rangle$ provoque une séquence de remplacements atomiques de 150 atomes environ, c'est-à-dire sur une distance telle que la quasi-totalité de l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé (environ 95 pour cent) soit dissipée par frottements électroniques. Il n'y a pas création d'autres défauts que la paire de FRENKEL composée de la lacune située au site initial du premier atome frappé et de l'interstitiel qui est le dernier atome frappé. Quand le premier atome frappé a reçu une impulsion initiale dans la direction $\langle 111 \rangle$, il y a une cascade dont les vingt-sept paramètres ont des valeurs anormalement différentes de celles des paramètres des cascades dont le premier atome frappé a reçu une impulsion dans une direction choisie au hasard (tableau V.11). Nous pensons que la différence avec les deux directions $\langle 110 \rangle$ et $\langle 100 \rangle$ tient au fait que dans la direction $\langle 111 \rangle$ la transparence définie par SOUTHERN et col. [89] (cf. chapitre II) est suffisamment importante pour que les atomes de la rangée de focalisation puissent entrer en collision avec les atomes des rangées environnantes.

Dans un réseau qui vibre à 15 K, les résultats que nous avons obtenus pour ces trois directions ne nous semblent pas être différents de ceux que nous

avons obtenus pour des cascades dont l'impulsion initiale du premier atome frappé a été choisie aléatoirement.

Nous avons fait une analyse factorielle avec les cascades que nous avons décrites et les deux populations de cinquante cascades chacune dans un réseau supposé statique et dans un réseau supposé vibrant à la température de 15 K. En projetant les points représentant les cascades sur les trois premiers plans principaux (figure V-17), nous avons trouvé que les cascades dans un réseau supposé statique dont les premiers atomes frappés ont reçu une impulsion initiale dans les directions $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ sont très différentes des autres. Leurs points représentatifs se projettent très loin en dehors des cadres des figures V-17. Ils sont distants du barycentre du nuage de points de 50 à 200 unités de distance euclidienne et ne sont pas à l'intérieur de l'ellipsoïde d'inertie du nuage de tous les points. Les ellipsoïdes d'inertie des populations de ces mêmes cascades mais dans un réseau vibrant à 15 K sont au contraire pratiquement incluses dans les ellipsoïdes d'inertie des populations de cascades dont le premier atome frappé a reçu une impulsion initiale dans une direction choisie aléatoirement. Cette observation confirme ce que nous avons écrit plus haut sur les comparaisons entre les valeurs des paramètres. Cependant, ces ellipsoïdes sont plus petites que les ellipsoïdes des populations de cascades dont le premier atome frappé a reçu une impulsion initiale dans une direction choisie aléatoirement et elles sont localisées près du côté positif de la deuxième direction propre (figure V-17-a). Ceci signifie que les cascades dont le premier atome frappé a reçu une impulsion initiale dans les directions $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ représentent une sous-population dans l'ensemble des cascades.

Nous pouvons donc conclure que :

- quand le réseau est supposé statique, il y a effectivement une influence du réseau qui se traduit par l'existence possible des focalisations,
- dans la réalité, quand le réseau a une vibration thermique, l'influence du réseau diminue, les cascades dont le premier atome frappé a reçu une impulsion initiale dans les directions de grande densité atomique forment une sous-population dans l'ensemble des cascades,
- la taille des populations que nous avons choisie (une cinquantaine d'individus) est suffisante pour pouvoir englober de ces cas spéciaux ; cette constatation confirme celle que nous avons faite après l'étude de la population de référence au paragraphe 1.1.2.

Ces conclusions, dont nous soupçonnions l'exactitude sans en être certain, sont donc confirmées par l'analyse factorielle. Elles nous conduisent à la conclusion suivante, dont nous avons des exemples de confirmation aux paragraphes II et III : les effets d'irradiation dans un solide cristallin suivent les mêmes lois que ceux dans un solide amorphe avec, éventuellement, ajustement de quelques paramètres pour tenir compte de la canalisation et du blocage des atomes énergiques par des rangées de grande densité atomique.

II - PARCOURS DES ATOMES DANS LE SOLIDE.

Nous savons que le parcours des projectiles dans le solide détermine la taille de la zone endommagée. Nous ne nous occupons ici que du parcours des atomes de même nature que ceux du métal étudié. Cette restriction, que nous pensons sans importance sur nos conclusions, nous permet d'économiser la taille mémoire de l'or-

dinateur.

Nous avons vu au chapitre II qu'un atome peut, dans certaines conditions, être canalisé. Aussi, après avoir étudié le parcours des atomes qui quittent leur site dans le solide (paragraphe 2.1) nous examinons le parcours des atomes extérieurs au solide (paragraphe 2.2) qui ont une probabilité plus grande d'être canalisés.

2.1 - Parcours des atomes du solide.

Le dommage d'irradiation est en grande partie dû aux atomes du solide qui ont reçu de la particule incidente ou d'un autre atome du solide une énergie suffisamment importante pour quitter son site initial. La connaissance du parcours de ces atomes nous permet de connaître la taille de la zone endommagée et la répartition spatiale des défauts créés. Nous traiterons dans ce paragraphe du pouvoir d'arrêt du solide et de la distribution statistique du parcours des atomes du solide.

2.1.1 - Distribution statistique des parcours atomiques.

Comme nous l'avons dit au chapitre II, la distribution du parcours des particules peut suivre l'une des trois lois suivantes :

- La loi de GAUSS,
- La loi de HOLMES [69],
- La loi de LEIBFRIED [67].

Nous pensons qu'il n'y a aucune raison de supposer que les parcours atomiques doivent suivre la loi gaussienne. Certains auteurs adoptent cette loi pour des raisons de facilité de calculs analytiques. Ces raisons n'ont plus de valeur avec les moyens informatiques dont nous disposons. La loi de HOLMES [69] implique que les parcours linéaires soient proportionnels à la racine carrée de l'énergie. Nous avons vu au chapitre IV que cette hypothèse est valable aux faibles énergies, mais, comme nous le verrons au paragraphe suivant, cette hypothèse s'avère fausse aux énergies supérieures à une vingtaine de kilo-électron-volts. En effet, nous verrons que la moyenne des parcours linéaires est proportionnelle à l'énergie et que par conséquent la loi de LEIBFRIED [67] est la plus pertinente. D'ailleurs, en ajustant les paramètres de ces trois lois aux résultats de nos simulations, nous avons trouvé que la loi de LEIBFRIED est celle qui s'ajuste la mieux.

Nous pouvons donc supposer que les parcours linéaires, donc, d'après les calculs de LEIBFRIED [67] (cf. chapitre II), les pénétrations et les distances parcourues suivent la loi :

$$f(\ell) = \frac{\ell}{\Lambda^2} \exp(-\ell/\Lambda) \quad (\text{V.5})$$

Λ est un paramètre à ajuster qui a les dimensions d'une longueur.

Par conséquent, un atome qui a reçu une impulsion initiale a la probabilité

$$p(\ell) = \int_{\ell}^{\infty} \frac{\ell}{\Lambda^2} \exp(-\ell/\Lambda) d\ell = \frac{\ell}{\Lambda} + 1 \exp(-\ell/\Lambda) \quad (\text{V.6})$$

de parcourir une distance égale ou supérieure à ℓ .

Nous avons essayé d'ajuster le paramètre Λ sur une cinquantaine de parcours atomiques. L'atome quitte son site dans une direction choisie aléatoirement

avec une énergie variant de 30 à 300 keV. Nous avons constaté (figures V-18) que la formule V-6 s'ajuste assez bien aux faibles parcours atomiques, mais qu'elle surestime largement la proportion d'atomes parcourant une grande distance. Il nous semble qu'il y a une distance limite aux parcours des atomes et que cette distance limite dépend de l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé. Elle est plus grande pour un réseau vibrant à 725 K que pour un réseau supposé statique.

Nous pensons pouvoir donner l'explication suivante : dans un réseau cristallin, un atome qui quitte son site est vite bloqué par les atomes qui l'entourent. Il doit donc exister une distance de blocage que peu d'atomes peuvent dépasser. Il est évident que plus un atome a reçu une énergie cinétique importante, plus il peut couvrir une grande distance. Donc cette distance de blocage doit croître avec l'énergie cinétique initiale du projectile. Quand il y a vibration thermique, le blocage du réseau s'atténue parce que, quand les atomes vibrent, il y a une petite probabilité pour que le projectile soit introduit dans un canal à la suite de l'écartement des atomes qui l'entourent (figure V-19). Nous verrons au paragraphe suivant que cette possibilité de canalisation explique la diminution du pouvoir d'arrêt du solide à haute température.

2.1.2 - Pouvoir d'arrêt du solide.

En partant de la formule (V.6), nous pourrions calculer le parcours linéaire moyen des atomes ayant une énergie donnée si nous connaissions la valeur du paramètre Λ , puisque nous avons :

$$\langle \ell \rangle = \int_0^{\infty} \frac{\ell^2}{\Lambda^2} \exp(-\ell/\Lambda) d\ell = 2\Lambda \quad (V.7)$$

le parcours linéaire moyen étant égal au double de la valeur du paramètre Λ .

Mais nous avons vu que la formule (V.6) ne s'applique qu'aux faibles distances à cause du blocage du réseau cristallin, un tel raisonnement nous conduirait à surestimer la vraie valeur de la moyenne. Nous supposons que la cinquantaine de parcours atomiques que nous avons simulés pour chaque énergie est suffisante pour nous donner une moyenne significative (ce dont nous doutons surtout aux grandes énergies). Nous avons simplement totalisé les parcours atomiques et divisé le total avec le nombre de simulations pour avoir le parcours moyen.

Nous avons trouvé que le parcours linéaire moyen varie proportionnellement avec l'énergie (figure V-20), c'est-à-dire que le pouvoir d'arrêt du solide est constant. Ce pouvoir d'arrêt est plus faible pour un réseau vibrant à la température de 725 K que pour un réseau supposé statique. Ceci s'explique aisément d'après le raisonnement du paragraphe précédent. A haute température, un atome qui quitte son site de réseau a une petite probabilité d'être canalisé. Or un atome qui est canalisé parcourt une plus grande distance que celui qui ne l'est pas et contribue à augmenter le parcours moyen de l'ensemble, c'est-à-dire à diminuer le pouvoir d'arrêt du solide (figure V-20).

En constatant que le pouvoir d'arrêt est une constante de l'énergie, nous confirmons les calculs de NIELSEN [53] (cf. chapitre II). Le pouvoir d'arrêt que nous avons trouvé est presque égal à celui calculé d'après la formule de NIELSEN (tableau V.11). Nous pensons que cette petite différence provient de la différence du modèle de potentiel employé dans les calculs : NIELSEN suppose un modèle de po-

tentiel MOL 2 qui est un modèle de type THOMAS-FERMI (cf. Annexe I). Ce qui nous étonne, c'est que nous avons trouvé presque le même résultat !

Les calculs de NIELSEN [53] supposent un solide amorphe. Les nôtres tiennent compte du réseau cristallin. La similitude des résultats nous suggère que, à part une petite correction qui tient compte de la nature cristalline du solide, fondamentalement il n'y a pas de différence entre un solide cristallin et un solide amorphe. Nous avons une confirmation de cette suggestion au paragraphe 2.2.2 où nous avons trouvé que le pouvoir d'arrêt d'un canal est plus faible que celui du solide tout entier mais est lui aussi indépendant de l'énergie cinétique initiale du projectile.

Nous remarquons qu'il y a contradiction entre ce résultat et celui du chapitre IV (paragraphe 2.1.3). Au chapitre IV, nous avons trouvé qu'aux faibles énergies nous avons un parcours linéaire proportionnel à la racine carrée de l'énergie cinétique initiale du projectile, c'est-à-dire que le pouvoir d'arrêt est proportionnel à l'inverse de la racine carrée de l'énergie cinétique initiale du projectile, ou, ce qui revient au même, proportionnel à la vitesse initiale du projectile. Cette contradiction n'est qu'apparente : nous ne nous situons pas dans les mêmes domaines d'énergies et la physique du problème est différente.

Dans nos simulations numériques aux faibles énergies, nous ne faisons rien d'autre que d'appliquer numériquement les méthodes de calculs des théoriciens qui ont proposé des formules analytiques de pouvoir d'arrêt électronique [54-64]. Tous ont trouvé un pouvoir d'arrêt proportionnel à la vitesse initiale du projectile. Il est donc normal que nous arrivions aussi au même résultat.

Dans nos simulations numériques aux grandes énergies, même si nous tenons compte du frottement électronique, la plupart des pertes d'énergie du projectile (dans le domaine de nos études, c'est-à-dire atomes ou ions lourds d'une énergie inférieure à 500 keV) sont dues à des collisions nucléaires. Dans ce cas-là aussi nous ne faisons qu'appliquer numériquement la méthode de calcul de NIELSEN, mais en tenant compte de la structure cristalline du solide. Nous devons donc nous attendre à avoir un pouvoir d'arrêt indépendant de l'énergie.

Quand les atomes sont déplacés de leur site d'une façon significative dans nos simulations avec le modèle ANGIANG, nous sommes dans une situation intermédiaire où il y a à la fois le frottement électronique et les collisions entre noyaux. Nous avons donc eu raison de ne pas introduire le frottement électronique dans nos simulations avec le modèle ANGIANG : nous en avons tenu compte implicitement.

2.2 - Parcours des atomes dans un canal.

La canalisation est très étudiée au point de vue théorique ou expérimentale [4-17], mais aussi au point de vue de la simulation [11, 34]. Elle n'est possible que quand l'atome est extérieur au réseau cristallin puisque nous avons vu au paragraphe 2.1 que les atomes du réseau sont bloqués par les rangées de grande densité atomique du réseau. Dans ce paragraphe nous allons traiter de la mise en évidence de la canalisation (paragraphe 2.2.1) puis du pouvoir d'arrêt du canal (paragraphe 2.2.2) et de la distribution des parcours atomiques dans le canal (paragraphe 2.2.3).

2.2.1 - Mise en évidence de la canalisation.

Nous avons montré au chapitre IV que, aux faibles énergies, où les interactions multiples sont nécessaires, la canalisation peut ne pas exister dans certaines directions de grande densité atomique à cause de la dissymétrie du cristal par rapport à l'axe du canal. La mise en évidence de la canalisation est plus aisée dans les domaines d'énergies supérieures au kilo-électron-volt. Au paragraphe 1.3.3 nous avons déjà mis en évidence la canalisation par comparaison avec une population de référence. Dans ce paragraphe, nous la mettons en évidence en faisant varier l'orientation du cristal par rapport au flux de particules incidentes.

Nous avons simulé numériquement le bombardement du plan (100) d'un cristal de cuivre supposé en réseau statique et à 723 K par des atomes Cu de 25 keV. Nous avons ensuite désorienté la surface bombardée d'un angle variant entre zéro et soixante degrés de telle façon que la vitesse reste parallèle au plan (110) du cristal. Le plan de bombardement et le plan de désorientation sont choisis pour la simplicité d'interprétation des résultats. Physiquement parlant, cela revient à faire pivoter le jet de projectiles autour d'un axe de direction $\langle \bar{1}10 \rangle$ (figure V-21). Nous avons arrêté la désorientation à partir de cinquante-cinq degrés parce que, au-delà, quelques projectiles peuvent être réfléchis par la surface irradiée, ce qui risque de biaiser l'étude statistique.

Pour chaque angle de désorientation, nous avons fait une centaine de simulations avec des points d'impact répartis au hasard de façon à nous rapprocher au maximum d'une expérience réelle de bombardement par un jet d'atomes. Si nous appelons parcours linéaires moyen la moyenne arithmétique des parcours linéaires de tous les projectiles ayant une vitesse de même orientation par rapport au réseau cristallin, nous constatons que le parcours linéaire moyen est plus important par rapport à l'ensemble des autres cas quand l'angle d'incidence est 0° , $19^\circ 28'$, $35^\circ 14'$, $54^\circ 44'$, ce qui correspond aux directions $\langle 001 \rangle$, $\langle 114 \rangle$, $\langle 112 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ (figures V-22 et V-23). Pour ces mêmes orientations cristallines, le parcours linéaire moyen est plus faible à 723 K qu'en réseau statique.

Ces résultats montrent bien qu'il y a eu canalisation dans les directions $\langle 001 \rangle$, $\langle 114 \rangle$, $\langle 112 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$: un certain nombre d'atomes ont été canalisés et ont pu parcourir une distance plus grande que normalement avant d'être stoppés, ce qui tend à augmenter le parcours linéaire moyen. Quand la température augmente, les canaux deviennent plus petits et il y a moins de canalisation, d'où une diminution du parcours linéaire moyen dans ces directions de grande densité atomique alors qu'ailleurs le parcours linéaire moyen est resté pratiquement inchangé.

Cette constatation nous conduit à confirmer la thèse de SOUTHERN et col. [89] sur la relation entre canalisation et "transparence" de la direction cristalline. La transparence d'une direction cristalline est le nombre ρ de rangées atomiques parallèles à cette direction qui traversent une unité de surface perpendiculaire à cette direction. Plus ce nombre ρ est grand, moins la canalisation, donc le parcours des particules, est importante. D'après le tableau V.12, nous avons une vérification de cette hypothèse. Quand la température augmente, les atomes vibrent et diminuent la "transparence" du canal. C'est ce qui explique la diminution du parcours linéaire moyen dans les directions de grande densité atomique quand la température augmente.

Nous pensons qu'il est prudent de nous en tenir à ces hypothèses qualitatives, puisque nous avons vu au chapitre IV que la canalisation peut ne pas exister dans les canaux qui sont dissymétriques par rapport à leur axe quand l'énergie cinétique de la particule incidente est faible.

2.2.2 - Pouvoir d'arrêt d'un canal.

Nous avons simulé la canalisation des atomes Cu dans la direction $\langle 100 \rangle$ du cuivre cubique à faces centrées. Les points d'impact avec la surface (100) sont répartis au hasard. Le réseau est supposé vibrant à 723 K. Nous n'avons pas pu faire nos simulations en réseau supposé statique à cause du coût en temps de calcul. Nous avons tenu compte des frottements électroniques. Le pouvoir d'arrêt que nous obtenons est donc le pouvoir d'arrêt total. Les énergies des atomes incidents varient de 10 à 350 keV. Pour chaque énergie, nous avons réalisé entre une cinquantaine et une centaine de simulations puis nous avons fait la moyenne des pénétrations.

Nous avons trouvé que la moyenne des pénétrations est proportionnelle à l'énergie cinétique initiale du projectile ce qui veut dire que le pouvoir d'arrêt du canal est une constante (figure V-20). Ce résultat est analogue à celui que nous avons obtenu au paragraphe 2.1 avec des atomes quittant leur site de réseau. Nous avons cependant un pouvoir d'arrêt trois fois plus faible dans le cas de la canalisation.

2.2.3 - Influence de la température.

Nous avons simulé la canalisation des atomes Cu de 25 keV dans la direction $\langle 100 \rangle$ du cuivre cubique à faces centrées. Les conditions de la simulation sont identiques à celles décrites au paragraphe 2.2.2. Le réseau cristallin est supposé vibrant entre 0 et 725 K.

Nous avons constaté que la moyenne des pénétrations diminue quand la température augmente (figure V-24). Ceci s'explique par le fait que, quand les atomes vibrent, ils diminuent la "transparence" du canal telle qu'elle est définie par SOUTHERN et col. [89].

Cette décroissance de la pénétration moyenne suit la loi :

$$R = R_0 \exp (- T/T_0) \quad (V.8)$$

R_0 = pénétration moyenne en réseau supposé statique

R = pénétration moyenne à la température T

T_0 = constante ayant la dimension d'une température.

Cette décroissance exponentielle est obtenue expérimentalement par HOWE et CHANNING [118] par irradiation du ^{136}Xe de 40 keV le long des directions $\langle 100 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$ dans l'or cubique à faces centrées.

Nous pouvons justifier leurs résultats et les nôtres par les calculs de LEHMANN et LEIBFRIED [92] qui ont trouvé qu'un atome parfaitement canalisé pénètre jusqu'à une distance :

$$R = R_0 \exp (- 2\bar{u}^2/a^2) \quad (V.9)$$

$\bar{u}$ = moyenne de l'amplitude de vibration atomique

a = rayon d'écrantage

Nous savons que, d'après le modèle de vibrations atomiques de DEBYE, l'amplitude

moyenne de vibration est $[111, 112]$ (cf. chapitre IV) :

$$\bar{u} = \frac{1}{\bar{\omega}_D} \sqrt{\frac{E}{m}} \quad (V.10)$$

$$\bar{\omega}_D = \frac{3}{4} \frac{k_B \Theta_D}{h} \quad (V.11)$$

$$E = 9 k_B T \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad (V.12)$$

Quand T est grand par rapport à Θ_D , nous avons

$$\int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \approx \int_0^{\Theta_D/T} x^2 dx = \frac{1}{3} \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^3 \quad (V.13)$$

d'où

$$E = 9 k_B T \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^3 \frac{1}{3} = 3 k_B T \quad (V.14)$$

Donc

$$\bar{u}^2 = \frac{16}{9} \times \frac{h^2}{k_B^2 \Theta_D^2} \times \frac{3 k_B T^2}{m} = \frac{16}{3} \frac{h^2 T}{k_B \Theta_D^2 m} \quad (V.15)$$

d'où l'équation (V.9) devient :

$$R = R_0 \exp \left(- 32 \frac{h^2 T}{a k_B \Theta_D^2 m} \right) \quad (V.16)$$

d'où

$$T_0 = \frac{a k_B \Theta_D^2 m}{32 h^2} \quad (V.17)$$

Ce qui montre bien une décroissance exponentielle quant la température croît.

2.2.4 - Distribution statistique des parcours atomiques dans un canal.

Nous avons étudié, sur les simulations décrites au paragraphe 2.2.2, la distribution statistique des pénétrations des atomes. Nous avons trouvé que la distribution statistique suit aussi la loi de LEIBFRIED [67] (figure V-25) comme pour les atomes quittant leur site de réseau (paragraphe 2.1). Nous nous attendons à trouver une séparation entre atomes au milieu du canal et atomes à la périphérie du canal, les premiers ayant un parcours plus important que les seconds. Nous n'avons trouvé qu'une distribution statistique conforme à la loi de LEIBFRIED [67], c'est-à-dire analogue à une distribution dans un solide amorphe. Nous nous sommes demandé si cette observation était due à la vibration thermique puisque nous avons supposé que le réseau vibre à 723 K. Mais nous avons déjà trouvé l'influence du canal à cette température (paragraphe 2.2.2) : le pouvoir d'arrêt est trois fois moindre. Dans ces conditions, si l'effet du canal ne se manifeste pas à 723 K sur la distribution statistique des pénétrations des atomes il ne nous semble pas probable qu'il se manifeste en réseau supposé statique.

D'après ce qui précède, nous pouvons conclure que nous pouvons traiter le cas de la canalisation comme un solide amorphe, mais nous devons introduire un facteur correctif pour tenir compte du fait que le parcours de la particule incidente est allongé.

III - CREATION DES DEFECTS.

Le problème de la création des défauts est double : la description du processus dynamique de création des défauts et la description des défauts créés après l'étape dynamique. Dans l'état actuel de la technologie du matériel informatique, il ne nous est pas possible d'étudier le processus de création des défauts sans entraîner une grosse dépense en moyens informatiques et sans nous noyer dans une grande masse d'informations. Mais l'étude du nombre de défauts créés et de leur répartition spatiale après l'étape dynamique suffit à l'établissement de plusieurs hypothèses sur l'étape dynamique de la création des défauts.

3.1 - Proposition d'un modèle général de création des défauts.

3.1.1 - Déplacements atomiques, recombinaison immédiate des paires de FRENKEL et défauts stables créés.

Tous les atomes du solide se déplacent plus ou moins dès qu'il y en a un qui a reçu une certaine énergie cinétique si infime soit-elle, mais nous ne pouvons pas en déduire que la moindre énergie communiquée à un atome du solide va créer autant de paires de FRENKEL qu'il y a d'atomes dans le solide.

En effet, si le déplacement atomique est trop faible, l'atome revient immédiatement à son site normal par relaxation. Si le déplacement est assez important, il ne peut plus revenir immédiatement à son site normal et, dans ce cas seulement, il y a une possibilité de création d'une paire de FRENKEL. Donc, pour étudier le nombre de défauts créés et leur répartition spatiale, nous devons nous restreindre à des déplacements atomiques qui dépassent une certaine distance δ_r appelée distance de recombinaison immédiate. Dans le cas d'une cascade dont le premier atome frappé a une énergie cinétique initiale supérieure à un kilo-électron-volt le nombre d'atomes déplacés dépasse la centaine quand on prend une énergie seuil de déplacement inférieure à une cinquantaine d'électron-volts. Il est alors possible de prendre une distance moyenne de recombinaison immédiate en supposant que cette recombinaison immédiate est isotrope dans l'espace. Le volume de recombinaison immédiate est donc supposé sphérique de rayon ρ_r dans le calcul qui suit, même si les calculs du groupe de BROOKHAVEN [25, 26] et ceux que nous avons effectués avec notre modèle DAGIANG aient montré que ce volume n'est pas exactement une sphère.

Pour étudier le nombre de défauts créés et leur répartition spatiale, nous pouvons donc procéder de la façon suivante :

(a) choisir une valeur de l'énergie seuil de déplacements au moins inférieure à celle nécessaire à la création d'une paire de FRENKEL dans la direction la plus favorable à une création de paire de FRENKEL,

(b) créer la cascade avec le modèle MARLOWE,

(c) éliminer les paires de FRENKEL dont la séparation lacune-interstitiel est inférieure au rayon de recombinaison immédiate, les défauts restants sont ceux qui sont créés par la cascade.

En procédant de cette façon, le calcul du nombre de paires de FRENKEL créées serait aisé si l'on connaissait la loi de distribution des distances lacunes-interstitiels.

3.1.2 - Modèle macroscopique de recombinaison des paires de FRENKEL créées par irradiation.

On pourrait proposer un modèle macroscopique avec les trois hypothèses suivantes :

- (a) la cascade produit uniformément des paires de FRENKEL dans un volume V ,
- (b) il ne peut y avoir plus d'un interstitiel dans un même volume de recombinaison immédiate,
- (c) les volumes de recombinaison immédiate de deux lacunes différentes ne se recoupent pas.

Quand le nombre de lacunes produites passe de n_ℓ à $n_\ell + dn_\ell$, l'augmentation dv du total des volumes de recombinaison est

$$dv = \left(1 - \frac{v}{V}\right) v_0 dn_\ell \quad (V.18)$$

v = total des volumes de recombinaison immédiate

v_0 = volume de recombinaison immédiate de chaque lacune

En intégrant de $v = 0$ à V_0 et $n_\ell = 0$ à v , nous avons

$$\frac{v_0}{V} = 1 - \exp(-v v_0/V) \quad (V.19)$$

c'est-à-dire la proportion du volume occupé par le total des volumes de recombinaison immédiate sur le volume de la cascade. Ce qui nous conduit au nombre de paires de FRENKEL restant après recombinaison immédiate :

$$v' = v \exp(-v v_0/V) \quad (V.20)$$

En prenant :

$$v_0 = \frac{4\pi}{3} r_0^3 \quad (V.21)$$

nous n'avons pas trouvé d'ajustements valables avec les résultats de nos simulations.

En réalité, ces hypothèses seraient valables si v_0 , c'est-à-dire r_0 , sont importants pour que l'on puisse mener ce raisonnement macroscopique. Or, les calculs du groupe de BROOKHAVEN [25, 26] et ceux que nous avons faits avec notre modèle DAGIANG montrent que la distance de recombinaison immédiate ne dépasse pas deux unités de réseau. Il nous faut donc faire un raisonnement microscopique.

3.1.3 - Modèle microscopique de recombinaison immédiate des paires de FRENKEL créées par irradiation.

Un atome incident entre en collision avec un atome cible et chasse celui-ci de son site. Il se forme par transport atomique une lacune et deux interstitiels. Le transport atomique vers une position interstitielle se fait selon deux processus :

- (a) Le processus A : un atome quitte l'emplacement où il est entré en collision avec un autre atome et va se placer en position interstitielle sans créer de déplacements atomiques supplémentaires.

- (b) Le processus B : un atome quitte l'emplacement où il est entré en collision avec un autre atome et va chasser un autre atome du solide pour lui prendre sa pla-

ce ; l'atome chassé de son site va en faire de même avec un troisième atome et ainsi de suite jusqu'à ce que le dernier atome chassé de son site aille se placer en position interstitielle comme suivant le processus A.

Nous savons d'après le paragraphe 2.1 qu'un atome du solide a une probabilité

$$p(\ell, E) \simeq \left(\frac{\ell}{\Lambda} + 1\right) \exp\left(-\frac{\ell}{\Lambda}\right) \quad (V.22)$$

Λ = distance fonction de l'énergie cinétique initiale E de l'atome

de parcourir une distance supérieure à ℓ . Donc, par le processus A, le transport atomique sur une distance supérieure à ℓ a la probabilité de la forme

$$p_a(\ell, E) \simeq \left(\frac{\ell}{\Lambda_a} + 1\right) \exp\left(-\frac{\ell}{\Lambda_a}\right) \quad (V.23)$$

Λ_a = distance fonction de l'énergie cinétique initiale E de l'atome.

Nous admettons deux hypothèses que nous ne pouvons pas justifier, mais dont les conclusions que nous pouvons en déduire ne sont pas en contradiction avec les résultats de nos simulations :

(a) Dans une séquence de remplacements, les atomes de la séquence se conduisent, en se relayant, à chaque collision, comme un seul atome. Il est donc normal que le processus de transport atomique B soit de même nature que le processus A avec la seule différence que plusieurs atomes interviennent dans le processus. Par conséquent, la probabilité pour que le transport atomique par le processus B se fasse sur une distance supérieure à ℓ doit avoir la même forme mathématique que celle du transport atomique par le processus A

$$p_b(\ell, E) \simeq \left(\frac{\ell}{\Lambda_b} + 1\right) \exp\left(-\frac{\ell}{\Lambda_b}\right) \quad (V.24)$$

Λ_b = distance fonction de l'énergie cinétique du premier atome de la séquence de remplacements.

(b) Au-dessus d'une certaine énergie, l'atome incident a une quasi-certitude de provoquer un déplacement atomique avec l'atome qui entre en collision avec lui. De même au-dessus d'une autre certaine énergie, il n'y a que très peu de chance pour qu'il y ait séquences de remplacements. Par conséquent, les énergies qui induisent une création de paire de FRENKEL sont des constantes caractérisant le processus de transport atomique de l'atome incident et celui de l'atome cible après la collision qui a provoqué la création de cette paire de FRENKEL. En d'autres termes, les distances Λ_a et Λ_b sont des constantes et ne dépendent pas de l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé.

Dans nos simulations avec le modèle MARLOWE, nous n'avons pas constaté de croisements de trajectoires des atomes différents de la cascade. Nous pouvons donc supposer que chaque création de paire de FRENKEL est indépendante des autres, c'est-à-dire que la probabilité est négligeable pour qu'un atome se trouve en position interstitielle près d'un site laissé vacant par un autre processus de création de paire de FRENKEL. Avec cette troisième hypothèse, la distance de transport atomique est aisée à déterminer : pour le processus A, elle est la distance de l'interstitiel au site laissé vacant par le premier atome de la séquence de remplacements. Nous

avons donc trois processus de création d'une paire de FRENKEL :

(a) Processus I : les deux atomes provoquent le transport atomique par le processus A.

(b) Processus II : les deux atomes provoquent le transport atomique par le processus B.

(c) Processus III : l'un des deux atomes provoque le transport atomique par le processus A et l'autre par le processus B.

La probabilité pour que, après la collision, la lacune créée soit à une distance supérieure à ℓ de tout interstitiel est le produit des probabilités de création d'un interstitiel à une distance supérieure à ℓ par l'atome incident et de création d'un interstitiel à une distance supérieure à ℓ par l'atome cible. Notons ces deux probabilités par

$$p_i = \left(\frac{\ell}{\Lambda_i} + 1 \right) \exp \left(- \frac{\ell}{\Lambda_i} \right) \quad (V.25)$$

$$p_c = \left(\frac{\ell}{\Lambda_c} + 1 \right) \exp \left(- \frac{\ell}{\Lambda_c} \right) \quad (V.26)$$

Λ_i et Λ_c = les distances caractéristiques des processus de transport atomique de l'atome incident et de l'atome cible respectivement. La probabilité pour que, après la collision, la lacune créée soit à une distance supérieure à ℓ de tout interstitiel est donc

$$p_f = \left(\frac{\ell}{\Lambda_i} + 1 \right) \left(\frac{\ell}{\Lambda_c} + 1 \right) \exp \left[- \ell \left(\frac{1}{\Lambda_i} + \frac{1}{\Lambda_c} \right) \right] \quad (V.27)$$

soient π_1 , π_2 et π_3 les proportions de paires de FRENKEL créées par les trois processus décrits ci-dessus. La proportion des distances lacunes-interstitiels supérieures à ℓ est :

$$\begin{aligned} p = & \pi_a \left(\frac{\ell}{\Lambda_a} + 1 \right)^2 \exp \left(- \frac{2\ell}{\Lambda_a} \right) + \pi_b \left(\frac{\ell}{\Lambda_b} + 1 \right)^2 \exp \left(- \frac{2\ell}{\Lambda_b} \right) \\ & + \pi_c \left(\frac{\ell}{\Lambda_a} + 1 \right) \left(\frac{\ell}{\Lambda_b} + 1 \right) \exp \left(- \frac{\ell}{\Lambda_a} - \frac{\ell}{\Lambda_b} \right) \end{aligned} \quad (V.28)$$

3.2.4 - Vérification du modèle de création des défauts proposé.

Puisque nous devons avoir :

$$\pi_a + \pi_b + \pi_c = 1 \quad (V.29)$$

nous pouvons écrire l'équation (V.28) sous la forme :

$$\begin{aligned} p = & \pi_a \left(\frac{\ell}{\Lambda_a} + 1 \right)^2 \exp \left(- \frac{2\ell}{\Lambda_a} \right) + \pi_b \left(\frac{\ell}{\Lambda_b} + 1 \right)^2 \exp \left(- \frac{2\ell}{\Lambda_b} \right) \\ & + (1 - \pi_a - \pi_b) \left(\frac{\ell}{\Lambda_a} + 1 \right) \left(\frac{\ell}{\Lambda_b} + 1 \right) \exp \left(- \frac{\ell}{\Lambda_a} - \frac{\ell}{\Lambda_b} \right) \end{aligned} \quad (V.30)$$

Ce qui nous fait quatre paramètres à ajuster.

D'après cette équation, les indices a et b jouent le même rôle. Nous ne pourrions donc pas savoir par ajustement quelles sont les valeurs qui correspondent aux paramètres indicés par a et lesquelles correspondent aux paramètres indicés par b. Puisque les paramètres indicés par b correspondent au processus II de création des défauts, c'est-à-dire une création de défauts par deux séquences de remplacements atomiques et puisque, d'après les simulations de séquences de remplacements décrites au chapitre IV, les séquences de remplacements allongent les distances lacunes-interstitiels des paires de FRENKEL créées, nous devrions avoir

$$\Lambda_b > \Lambda_a \quad (V.31)$$

Nous pensons donc qu'il faudrait affecter d'un indice b le couple de paramètres Λ et π dont la valeur de la distance Λ est la plus grande.

Nous avons essayé de vérifier nos hypothèses du paragraphe 3.2.3 en simulant des cascades dans le cuivre avec le modèle MARLOWE et en ajustant les quatre paramètres de l'équation (V.30).

Nous avons simulé dix cascades dont le premier atome frappé quitte un site de réseau dans une direction choisie au hasard par rapport au réseau cristallin avec, une énergie cinétique initiale de 20 keV. Les énergies de coupure et de seuil de déplacements sont égales à 25 eV. Le réseau cristallin est supposé statique. Nous n'avons pas tenu compte des frottements électroniques. Les valeurs des paramètres que nous avons trouvées sont indiquées au tableau V.14.

En constatant que les valeurs de p obtenues par simulation peuvent varier jusqu'à cinq pour cent quelle que soit la valeur de ℓ , nous avons fait une évaluation de l'erreur sur les paramètres calculés à partir de l'équation (V.30). Les résultats indiqués au tableau V.13 montrent que les erreurs calculées sont supérieures aux incertitudes sur la valeur moyenne des paramètres sauf pour Λ_b dont l'erreur calculée est légèrement inférieure. Nous en déduisons que le modèle de création des défauts que nous avons décrit au paragraphe 3.2.3 est plausible.

D'après les résultats de l'ajustement, nous avons π_c nul, ce qui veut dire que le processus III de création de lacunes que nous avons décrit au paragraphe 3.2.3 n'existe pas. Nous pouvons en conclure que la création des paires de FRENKEL par irradiation ne peut se faire que par l'un ou l'autre des processus I et II décrits au paragraphe 3.2.2 et que les paires de FRENKEL créées par le processus I sont majoritaires à 67.6 pour cent.

D'après la figure V-26, nous constatons que l'ajustement est très bon. Comme nous avons une vingtaine de points obtenus par simulation pour quatre paramètres à ajuster, nous pensons que ce bon ajustement n'est pas dû au grand nombre de paramètres à ajuster par rapport aux points "expérimentaux". Les constantes que nous avons obtenues sont donc des constantes caractérisant les processus de création des paires de FRENKEL que nous avons décrit au paragraphe 3.2.3. Nous pouvons donc déclarer que l'hypothèse (a) que nous avons émis au paragraphe 3.2.3 selon laquelle la distribution statistique des distances de transports atomiques par le processus B a la même forme mathématique que celle des distances de transports atomiques par le processus A est vérifié.

Nous avons refait les mêmes simulations mais avec des premiers atomes frappés d'énergies cinétiques initiales différentes. Nous avons trouvé des paramètres de l'équation (V.30) qui se trouvent dans les domaines d'incertitudes que nous

avons indiqués au tableau V.13. Nous en concluons que les paramètres de l'équation (V.30) ne doivent pas dépendre de l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé. Par conséquent, l'hypothèse (b) que nous avons émise au paragraphe 3.2.3 selon laquelle les paramètres Λ_a et Λ_b sont des constantes, nous semble vérifiée. Nous pouvons aussi en conclure que, quelle que soit l'énergie cinétique initiale du premier atome frappé, la proportion de paires de FRENKEL créées par un processus donné est la même : environ deux tiers par le processus I, un tiers par le processus II et aucune par le processus III.

Nous avons ainsi vérifié le modèle de création des défauts que nous avons proposé au paragraphe 3.2.3.

3.3 - Répartition spatiale des défauts.

A part le problème de la distribution statistique des distances lacunes-interstitiels des paires de FRENKEL créées par irradiation que nous avons traité au paragraphe précédent, nous ne pensons pas que le modèle MARLOWE puisse nous donner d'autres résultats quantitatifs que la création des défauts. Avec notre programme MAIANH, nous pouvons donner une description qualitative de la distribution spatiale des défauts.

Nous avons simulé des cascades dans le fer, le cuivre, le molybdène, l'argent, le tungstène et l'or. Chaque simulation nous donne les coordonnées des lacunes et des interstitiels qui ont été créés. Nous avons visualisé ces défauts avec notre programme MAIANH.

Comme prévu par BRINKMAN [78], nous avons constaté que les lacunes sont au centre de la zone endommagée et que cette zone endommagée est entourée d'une couche d'interstitiels (figures V-27 à V-29). Nous avons une confirmation de cette observation quand nous faisons les statistiques sur la distribution des lacunes et des interstitiels en fonction de leur distance au centre de la zone endommagée (figure V-30) : les interstitiels sont plus éloignés du centre de la zone endommagée que les lacunes. Cette constatation est de plus en plus évidente quand nous éliminons les paires de FRENKEL qui ont une distance lacune-interstitiel inférieure au rayon de recombinaison immédiate et quand nous augmentons ce rayon de recombinaison immédiate. Elle est valable pour une cascade dans un réseau supposé statique comme pour une cascade dans un réseau qui a une vibration thermique. Ceci pourrait donc confirmer la description par BRINKMAN [78] de la création de la pointe de déplacements.

L'observation de la répartition spatiale des défauts avec le programme MAIANH ne nous a pas permis de donner une forme spéciale à la zone endommagée. En particulier, nous n'avons pas retrouvé la forme ellipsoïdale proposée par LINDHARD [54].

Cependant, quand il y a canalisation, la zone endommagée a la forme d'une épingle avec la pointe près du site initial du premier atome frappé et la tête à la zone où finit l'étape dynamique de la cascade (figure V-28). Cette forme d'épingle est assez aisée à expliquer : nous savons que, quand il y a canalisation, la création de défauts est faible au début de l'étape dynamique et un peu plus importante à la fin parce que, au début de la création de la cascade, les collisions sont à faible échange d'énergie avec les atomes entourant le canal alors que, à la fin, les échanges d'énergie sont relativement plus importants et peuvent créer des dé-

fauts sur une zone relativement étendue. Quand nous introduisons une petite vibration thermique ou quand nous modifions un peu la trajectoire de la situation de canalisation parfaite, nous constatons que cette forme d'épingle subsiste, ce qui prouve que la canalisation est un phénomène stable.

En principe le même raisonnement devrait être valable pour la focalisation. Or il n'en est rien. Quand nous nous trouvons en situation de focalisation parfaite suivant la direction de plus grande densité atomique d'un réseau supposé statique, nous avons une seule paire de FRENKEL comme nous l'avons indiqué au paragraphe 1.3.2. Quand nous introduisons une vibration thermique ou quand nous dévions un petit peu de la situation de focalisation parfaite, nous retrouvons une forme de cascade qui n'est pas différente d'une cascade créée au hasard (figure V-29). Ce résultat constitue une autre confirmation de l'instabilité de la focalisation.

Tableau V.1

CARACTERISTIQUES DE LA POPULATION DE REFERENCE

ENERGIE CINETIQUE INITIALE DU PREMIER ATOME FRAPPE	500 EV
NATURE DU CRISTAL	CUIVRE CUBIQUE A FACES CENTREES
TEMPERATURE DU CRISTAL	RESEAU SUPPOSE STATIQUE
MODELE DE POTENTIEL INTER ATOMIQUE	
MODELE DE MOLIÈRE	AVEC UN RAYON D' ECRANTAGE EGAL A 0.0738 ANGSTROM
MODELE DE FROTTEMENTS ELECTRONIQUES	MODELE DE FIRSOV
ENERGIE SEUIL DE DEPLACEMENTS	2.5 EV
ENERGIE DE COUPURE	2.5 EV

Tableau V.2

REGROUPEMENTS DES PARAMETRES CARACTERISANT LES CASCADES
DE LA POPULATION DE REFERENCE

A - PARCOURS DU PREMIER ATOME FRAPPE

PARAMETRE NUMERO 15
DISTANCE PARCOURUE PAR LE PREMIER ATOME FRAPPE

PARAMETRE NUMERO 16
PENETRATION DU PREMIER ATOME FRAPPE

PARAMETRE NUMERO 17
DEPLACEMENT LATERAL DU PREMIER ATOME FRAPPE

PARAMETRE NUMERO 18
PARCOURS LINEAIRE DU PREMIER ATOME FRAPPE

B - DEPLACEMENTS ATOMIQUES

PARAMETRE NUMERO 1
NOMBRE DE COLLISIONS

PARAMETRE NUMERO 2
NOMBRE D' ATOMES DEPLACES
PARAMETRE NUMERO 4
NOMBRE DE REMPLACEMENTS ATOMIQUES

PARAMETRE NUMERO 5
NOMBRE DE SEQUENCES DE FOCALISATION

PARAMETRE NUMERO 13
NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (110)

PARAMETRE NUMERO 25
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.75 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 26
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.00 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 27
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.25 U. RESEAU

C - REPARTITION SPATIALE DES DEFAUTS

PARAMETRE NUMERO 10
NOMBRE TOTAL DE CHOCS QUASI-FRONTAUX

PARAMETRE NUMERO 20
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.50 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 21
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.75 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 22
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.00 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 23
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.25 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 24
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.50 U. RESEAU

Tableau V.3

COMPARAISON DE DEUX POPULATIONS

AYANT LES MEMES CARACTERISTIQUES QUE LA POPULATION DE REFERENCE

Moyennes (ligne supérieure) et écarts-types (ligne inférieure) de chaque population
Les énergies sont exprimées en électrons-volts et les distances en U. de réseau

	ENSEMBLE	1 (*)	2
NOMBRE DE COLLISIONS	390.26 48.24	374.52 41.36	406.00 49.48
NOMBRE D' ATOMES DEPLACES	245.68 38.70	240.80 36.49	250.56 40.20
NOMBRE DE LACUNES CREEES	75.73 3.98	76.14 4.09	75.32 3.82
NOMBRE DE REMPLACEMENTS ATOMIQUES	169.93 39.41	164.62 37.42	175.24 40.61
NOMBRE DE SEQUENCES DE FOCALISATION	6.53 2.32	6.32 2.31	6.74 2.30
PERTE D' ENERGIE PAR FROTTEMENTS ELECTRONIQUES	59.03 3.22	57.56 2.66	60.50 3.06
ENERGIE CINETIQUE RESTANTE APRES L' ARRET DS ATOMES ENERGISTIQUES	96.39 8.53	95.62 7.58	97.15 9.33
PERTE D' ENERGIE PAR TRANSMISSIONS D' ENERGIES INFERIEURES A L' ENERGIE SEUIL	344.60 9.72	346.86 8.69	342.34 10.16
PERTE D' ENERGIE PAR REMPLACEMENTS ATOMIQUES	43.73 32.60	40.94 25.43	46.52 38.26
NOMBRE TOTAL DE CHOCS QUASI-FRONTALX	40.94 4.96	40.64 4.66	41.24 5.22
NOMBRE DE CHOCS QUASI-FRONTALX SIMPLES	20.06 4.18	20.08 4.20	20.04 4.15
NOMBRE DE DOUBLES CHOCS QUASI-FRONTALX	8.56 2.48	8.36 2.14	8.76 2.75

(*) POPULATION DE REFERENCE

Tableau V.3 (suite)

NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (110)

10.69	10.20	11.18
3.22	3.14	3.24

NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (100)

1.39	1.66	1.12
1.25	1.45	0.93

DISTANCE PARCOURUE PAR LE PREMIER ATOME FRAPPE

3.09	2.95	3.23
1.42	1.07	1.69

PENETRATION DU PREMIER ATOME FRAPPE

2.64	2.47	2.80
1.42	1.15	1.63

DEPLACEMENT LATERAL DU PREMIER ATOME FRAPPE

1.43	1.42	1.45
0.72	0.61	0.83

PARCOURS LINEAIRE DU PREMIER ATOME FRAPPE

3.65	3.54	3.76
1.41	1.11	1.66

NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.25 U. RESEAU

75.28	75.84	74.72
4.09	4.20	3.90

NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.50 U. RESEAU

43.37	43.02	43.72
3.98	4.35	3.53

NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.75 U. RESEAU

40.06	39.88	40.24
3.91	3.93	3.87

NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.00 U. RESEAU

32.34	32.30	32.38
3.74	3.73	3.74

NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.25 U. RESEAU

28.32	27.90	28.74
2.92	2.65	3.14

NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.50 U. RESEAU

24.89	24.84	24.94
3.16	2.85	3.44

NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.75 U. RESEAU

21.69	21.84	21.54
3.02	3.13	2.89

NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.00 U. RESEAU

20.45	20.62	20.28
2.94	2.96	2.91

NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.25 U. RESEAU

18.51	18.66	18.36
2.95	2.84	3.04

Tableau V.4

INFLUENCE DU MODELE DE POTENTIEL INTERATOMIQUE

Moyennes (ligne supérieure) et écarts-types (ligne inférieure) de chaque population
Les énergies sont exprimées en électrons-volts et les distances en U. de réseau

RAYONS D' ECRANTAGE DU MODELE DE POTENTIEL DE MOLIERE						(EN ANGSTROM)	
ENSEMBLE	0.0364	0.0492	0.0738 (*)	0.0834	0.0960	0.1476	0.1668
NOMBRE DE COLLISIONS							
434.82	469.12	418.28	374.52	487.14	538.74	466.40	289.54
90.49	27.73	14.50	41.36	43.80	58.91	64.30	66.49
NOMBRE D' ATOMES DEPLACES							
296.37	78.06	119.40	240.80	385.86	477.88	477.06	295.50
157.61	8.89	8.30	36.49	45.22	68.23	70.39	71.26
NOMBRE DE LACUNES CREEES							
60.42	49.92	67.96	76.14	75.70	76.34	46.44	30.46
17.72	4.69	4.36	4.09	6.10	7.30	4.95	5.48
NOMBRE DE REMPLACEMENTS ATOMIQUES							
236.02	29.14	51.44	164.62	310.16	401.54	431.02	265.20
156.22	6.13	7.16	37.42	45.37	63.83	67.30	67.27
NOMBRE DE SEQUENCES DE FOCALISATION							
15.89	0.0	0.0	6.32	18.50	28.00	36.34	22.04
13.74	0.0	0.0	2.31	3.41	5.07	5.98	6.05
PERTE D' ENERGIE PAR FROTTEMENTS ELECTRONIQUES							
81.91	254.38	149.86	57.56	48.32	38.11	13.84	11.33
82.77	14.48	8.95	2.66	3.35	2.07	1.74	4.70
ENERGIE CINETIQUE RESTANTE APRES L' ARRET DS ATOMES ENERGIQUES							
213.96	84.79	108.30	95.62	137.15	187.18	435.65	449.06
148.44	10.06	8.99	7.58	14.65	20.36	13.48	17.12
PERTE D' ENERGIE PAR TRANSMISSIONS D' ENERGIES INFERIEURES A L' ENERGIE SEUIL							
204.09	160.81	241.85	346.86	314.36	274.71	50.51	39.53
115.15	10.25	8.01	8.69	16.05	21.12	13.06	14.07
PERTE D' ENERGIE PAR REMPLACEMENTS ATOMIQUES							
69.25	34.59	45.69	40.94	45.34	46.89	99.49	171.84
63.78	22.26	36.61	25.43	29.64	23.33	45.08	86.42
NOMBRE TOTAL DE CHOCS QUASI-FRONTAUX							
36.43	21.28	34.58	40.64	44.52	44.90	41.60	27.52
9.69	4.25	4.10	4.66	4.39	5.19	5.24	5.77
NOMBRE DE CHOCS QUASI-FRONTAUX SIMPLES							
13.17	15.10	21.88	20.08	15.82	11.14	4.20	3.96
7.37	3.61	3.94	4.20	3.49	2.96	2.31	2.13
NOMBRE DE DOUBLES CHOCS QUASI-FRONTAUX							
5.05	5.62	9.84	8.36	5.96	3.28	0.84	1.46
3.73	1.95	3.26	2.14	2.18	1.41	1.07	1.22

(*) POPULATION DE REFERENCE

Tableau V.4 (suite)

NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (110)							
17.53	0.36	1.88	10.20	21.46	30.26	36.48	22.10
13.52	0.52	1.38	3.14	4.12	5.21	5.96	6.05
NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (100)							
0.39	0.02	0.24	1.66	0.54	0.28	0.0	0.0
0.86	0.14	0.43	1.45	0.75	0.49	0.0	0.0
DISTANCE PARCOURUE PAR LE PREMIER ATOME FRAPPE							
4.36	12.11	8.62	2.95	2.42	2.22	1.16	1.06
6.50	11.30	7.42	1.07	1.07	0.76	0.47	0.43
PENETRATION DU PREMIER ATOME FRAPPE							
3.69	9.85	7.56	2.47	2.11	1.95	1.01	0.88
5.71	10.11	6.90	1.15	1.02	0.70	0.46	0.33
DEPLACEMENT LATERAL DU PREMIER ATOME FRAPPE							
1.99	6.11	3.52	1.42	1.06	0.96	0.46	0.43
3.31	6.09	3.47	0.61	0.63	0.51	0.37	0.49
PARCOURS LINEAIRE DU PREMIER ATOME FRAPPE							
5.08	14.00	9.83	3.54	2.81	2.64	1.45	1.30
6.85	11.31	7.35	1.11	1.12	0.87	0.60	0.62
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.25 U. RESEAU							
54.53	49.92	67.96	75.84	61.74	55.06	43.28	27.94
15.64	4.69	4.36	4.20	4.40	6.24	5.02	5.43
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.50 U. RESEAU							
44.45	48.26	56.66	43.02	46.70	47.56	41.88	27.06
9.71	4.36	3.73	4.35	4.78	6.15	5.07	5.65
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.75 U. RESEAU							
39.57	40.12	45.96	39.88	42.64	42.92	39.68	25.76
7.64	3.81	3.53	3.93	4.61	5.71	5.53	5.37
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.00 U. RESEAU							
34.30	36.96	41.24	32.30	32.84	35.60	37.68	23.56
6.98	3.58	3.30	3.73	3.87	5.31	5.88	6.02
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.25 U. RESEAU							
31.14	31.72	33.28	27.90	30.40	34.06	37.38	23.26
6.17	3.36	3.05	2.65	4.19	5.25	5.76	5.94
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.50 U. RESEAU							
28.84	28.78	28.50	24.84	27.94	32.54	36.84	22.42
6.23	2.98	3.08	2.85	3.73	5.12	5.81	5.94
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.75 U. RESEAU							
26.98	25.50	25.04	21.84	25.96	31.58	36.68	22.26
6.65	3.02	2.71	3.13	3.92	4.99	5.88	6.11
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.00 U. RESEAU							
25.75	22.98	22.10	20.62	24.92	30.98	36.52	22.14
6.95	2.45	2.40	2.96	3.91	5.10	5.94	6.06
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.25 U. RESEAU							
24.57	20.88	19.56	18.66	23.74	30.58	36.44	22.10
7.45	2.31	2.36	2.84	3.90	5.06	5.90	6.05

Tableau V.5

INFLUENCE DU MODELE DE FROTTEMENTS ELECTRONIQUES

Moyennes (ligne supérieure) et écarts-types (ligne inférieure) de chaque population
Les énergies sont exprimées en électrons-volts et les distances en U. de réseau

	EXPOSANTS DU DENOMINATEUR DE LA FORMULE DE FIRSOV					
	ENSEMBLE	*3	*4	*5 (*)	*6	*7
NOMBRE DE COLLISIONS						
	352.06	172.42	307.14	374.52	445.92	460.30
	113.77	18.28	35.23	41.36	58.78	51.60
NOMBRE D' ATOMES DEPLACES						
	217.33	88.38	174.42	240.80	285.90	297.16
	85.43	11.00	28.38	36.49	45.70	45.29
NOMBRE DE LACUNES CREEFS						
	70.07	43.98	64.80	76.14	82.06	83.36
	15.12	2.99	3.88	4.09	4.38	4.17
NOMBRE DE REMPLACEMENTS ATOMIQUES						
	147.23	44.40	109.52	164.62	203.82	213.80
	73.12	11.67	29.29	37.42	46.77	47.08
NOMBRE DE SEQUENCES DE FOCALISATION						
	5.71	0.10	1.64	6.32	9.80	10.70
	4.81	0.30	1.29	2.31	3.04	3.03
PERTE D' ENERGIE PAR FROTTEMENTS ELECTRONIQUES						
	102.11	279.26	140.71	57.56	23.78	9.25
	99.75	9.07	6.61	2.66	1.58	0.72
ENERGIE CINETIQUE RESTANTE APRES L' ARRET DS ATOMES ENERGIQUES						
	87.00	36.40	68.00	95.62	115.64	119.34
	32.84	6.44	8.24	7.58	10.42	16.01
PERTE D' ENERGIE PAR TRANSMISSIONS D' ENERGIES INFERIEURES A L' ENERGIE SEUIL						
	310.48	184.31	291.21	346.86	360.58	369.42
	69.40	9.29	9.51	8.69	10.96	10.71
PERTE D' ENERGIE PAR REMPLACEMENTS ATOMIQUES						
	44.71	37.57	43.82	40.94	45.78	55.47
	49.31	34.67	38.46	25.43	59.15	71.73
NOMBRE TOTAL DE CHOCS QUASI-FRONTAUX						
	36.99	21.70	34.70	40.64	43.64	44.26
	9.51	2.92	4.89	4.66	4.74	5.15
NOMBRE DE CHOCS QUASI-FRONTAUX SIMPLES						
	18.67	12.96	18.40	20.78	21.60	20.32
	5.02	2.67	4.63	4.20	4.07	4.15
NOMBRE DE DOUBLES CHOCS QUASI-FRONTAUX						
	7.54	4.64	6.80	8.36	8.70	9.20
	2.95	2.56	2.03	2.14	2.69	2.68

(*) POPULATION DE REFERENCE

Tableau V.5 (suite)

NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (110)					
9.55	3.86	8.52	10.20	12.28	12.90
4.46	2.05	3.05	3.14	3.51	3.36
NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (100)					
1.00	0.14	0.78	1.66	0.96	1.46
1.13	0.40	0.78	1.45	0.87	1.17
DISTANCE PARCOURUE PAR LE PREMIER ATOME FRAPPE					
3.15	3.31	2.89	2.95	3.31	3.26
1.47	1.29	1.40	1.07	1.74	1.66
PENETRATION DU PREMIER ATOME FRAPPE					
2.69	2.92	2.38	2.47	2.79	2.89
1.42	1.25	1.42	1.15	1.65	1.51
DEPLACEMENT LATERAL DU PREMIER ATOME FRAPPE					
1.44	1.41	1.44	1.42	1.60	1.35
0.81	0.64	0.75	0.61	0.98	0.98
PARCOURS LINEAIRE DU PREMIER ATOME FRAPPE					
3.67	3.73	3.41	3.54	3.88	3.78
1.43	1.21	1.34	1.11	1.67	1.65
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.25 U. RESEAU					
69.74	43.84	64.40	75.84	81.68	82.96
15.06	2.56	4.03	4.20	4.46	4.25
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.50 U. RESEAU					
39.68	23.68	37.12	43.02	47.18	47.40
9.65	2.83	4.00	4.35	3.97	4.12
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.75 U. RESEAU					
36.84	22.36	34.44	39.88	43.46	44.06
8.82	2.73	3.74	3.93	3.89	4.01
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.00 U. RESEAU					
29.54	17.82	27.36	32.30	34.48	35.72
7.30	2.12	3.50	3.73	2.94	3.82
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.25 U. RESEAU					
26.04	15.40	24.44	27.90	30.64	31.84
6.62	2.15	3.23	2.65	3.02	3.77
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.50 U. RESEAU					
22.84	13.30	21.04	24.84	27.02	28.02
6.14	1.97	3.25	2.85	3.02	3.77
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.75 U. RESEAU					
19.66	11.14	18.00	21.84	23.36	23.94
5.60	1.51	3.01	3.13	3.21	3.64
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.00 U. RESEAU					
18.39	10.16	16.90	20.62	21.52	22.68
5.32	1.49	3.01	2.96	2.78	3.25
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.25 U. RESEAU					
16.69	8.56	15.24	18.66	19.62	20.96
5.09	1.33	3.02	2.84	2.74	3.25

Tableau V.6

INFLUENCE DE L'ENERGIE SEUIL DE DEPLACEMENTS

Moyennes (ligne supérieure) et écarts-types (ligne inférieure) de chaque population
Les énergies sont exprimées en électrons-volts et les distances en U. de réseau

ENSEMBLE	ENERGIES SEUILS DE DEPLACEMENTS						
	2.5 EV (*)	5. EV	10. EV	20. EV	30. EV	40. EV	50. EV
NOMBRE DE COLLISIONS							
114.10	374.52	182.20	98.46	53.00	37.28	29.04	24.18
119.50	41.36	21.43	9.37	4.96	2.78	2.89	2.74
NOMBRE D' ATOMES DEPLACES							
60.50	240.80	90.88	42.42	20.40	12.74	9.06	7.18
80.09	36.49	18.75	7.57	3.35	2.03	1.69	1.53
NOMBRE DE LACUNES CREEES							
23.42	76.14	39.14	21.16	10.72	7.20	5.34	4.26
24.45	4.09	2.88	2.12	1.31	1.15	0.99	0.82
NOMBRE DE REMPLACEMENTS ATOMIQUES							
37.31	164.62	52.34	21.26	9.68	6.62	3.72	2.92
56.77	37.42	17.87	7.67	3.11	7.90	1.79	1.52
NOMBRE DE SEQUENCES DE FOCALISATION							
1.05	6.32	1.02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
2.38	2.31	1.03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PERTE D' ENERGIE PAR FROTTEMENTS ELECTRONIQUES							
38.70	57.56	49.05	42.13	35.22	31.33	28.72	26.86
10.83	2.86	2.61	2.19	2.20	2.20	2.42	2.34
ENERGIE CINETIQUE RESTANTE APRES L' ARRET DS ATOMES ENERGIQUES							
124.65	95.62	107.12	127.85	136.00	135.05	135.27	135.63
29.51	7.58	14.26	18.55	27.00	29.50	32.17	35.00
PERTE D' ENERGIE PAR TRANSMISSIONS D' ENERGIES INFERIEURES A L' ENERGIE SEUIL							
336.51	346.86	343.91	330.00	328.78	332.49	336.02	337.50
25.85	8.69	14.63	18.38	26.68	29.48	31.47	34.61
PERTE D' ENERGIE PAR REMPLACEMENTS ATOMIQUES							
111.04	40.94	52.85	78.95	120.36	141.32	160.60	182.26
86.43	25.43	33.37	52.57	80.39	79.77	87.82	96.78
NOMBRE TOTAL DE CHOCS QUASI-FRONTAUX							
12.39	40.64	19.90	11.42	5.94	4.00	2.68	2.16
13.13	4.66	2.95	2.01	1.52	1.18	1.10	1.01
NOMBRE DE CHOCS QUASI-FRONTAUX SIMPLES							
6.78	20.08	11.22	7.00	3.24	2.70	1.74	1.46
6.73	4.20	3.32	1.74	1.41	1.22	1.09	0.92
NOMBRE DE DOUBLES CHOCS QUASI-FRONTAUX							
2.96	9.36	4.64	2.96	2.10	1.12	0.88	0.66
2.91	2.14	1.96	1.40	1.04	0.91	0.93	0.71

(*) POPULATION DE REFERENCE

Tableau V.6 (suite)

NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (110)							
2.00	10.20	2.50	0.82	0.38	0.08	0.02	0.02
3.70	3.14	1.43	0.84	0.52	0.27	0.14	0.14
NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (100)							
0.48	1.66	1.06	0.44	0.14	0.02	0.02	0.0
0.93	1.45	0.95	0.61	0.40	0.14	0.14	0.0
DISTANCE PARCOURUE PAR LE PREMIER ATOME FRAPPE							
2.73	2.95	2.89	2.82	2.70	2.64	2.59	2.50
1.07	1.07	1.06	1.02	1.02	0.97	0.97	0.94
PENETRATION DU PREMIER ATOME FRAPPE							
2.38	2.47	2.52	2.46	2.38	2.31	2.30	2.24
1.04	1.15	1.10	1.05	1.04	0.96	0.97	0.93
DEPLACEMENT LATERAL DU PREMIER ATOME FRAPPE							
1.20	1.42	1.37	1.26	1.16	1.12	1.07	1.00
0.56	0.61	0.56	0.54	0.53	0.53	0.53	0.52
PARCOURS LINEAIRE DU PREMIER ATOME FRAPPE							
3.11	3.54	3.39	3.23	3.06	2.95	2.87	2.75
1.09	1.11	1.13	1.06	1.08	1.03	1.02	1.00
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.25 U. RESEAU							
23.38	75.84	39.14	21.16	10.72	7.20	5.36	4.26
24.36	4.20	2.88	2.12	1.31	1.15	1.02	0.82
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.50 U. RESEAU							
14.23	43.02	23.04	13.50	7.52	5.26	4.00	3.28
13.57	4.35	2.68	1.62	1.19	0.91	0.80	0.75
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.75 U. RESEAU							
13.08	39.88	21.22	12.32	7.02	4.70	3.58	2.86
12.61	3.93	2.35	1.59	1.33	0.78	0.87	0.72
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.00 U. RESEAU							
11.32	32.30	19.18	11.34	6.36	4.34	3.14	2.60
10.21	3.73	2.50	1.42	1.16	0.74	0.80	0.80
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.25 U. RESEAU							
9.53	27.90	15.86	9.54	5.08	3.48	2.68	2.18
8.87	2.65	2.26	1.20	0.93	0.81	0.65	0.71
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.50 U. RESEAU							
8.36	24.84	13.80	8.08	4.42	2.96	2.44	1.98
7.91	2.85	1.92	1.41	1.04	0.80	0.67	0.65
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.75 U. RESEAU							
7.30	21.84	11.86	6.88	3.86	2.74	2.18	1.76
6.97	3.13	1.94	1.18	1.00	0.82	0.79	0.65
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.00 U. RESEAU							
6.67	20.62	10.90	5.86	3.34	2.40	1.96	1.58
6.63	2.96	2.01	1.20	0.95	0.77	0.75	0.60
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.25 U. RESEAU							
6.01	18.66	9.52	5.36	3.04	2.22	1.78	1.48
5.98	2.84	2.14	1.28	0.87	0.73	0.64	0.57

Tableau V.7

CARACTERISTIQUES DES METAUX ETUDIES

Métal	Symbole	Masse atomique	Numéro atomique	Structure cristalline	Paramètre du réseau
Fer	Fe	55,85	26	b.c.c.	2,8664
Cuivre	Cu	63,54	29	f.c.c.	3,1563
Molybdène	Mo	95,94	42	b.c.c.	3,146
Argent	Ag	107,87	47	f.c.c.	4,0856
Tungstène	W	183,92	74	b.c.c.	3,1648
Or	Au	197,97	79	f.c.c.	4,0783

b.c.c. = cubique centré

f.c.c. = cubique à faces centrées

Tableau V.8

INFLUENCE DE LA NATURE DU SOLIDE IRRADIE

Moyennes (ligne supérieure) et écarts-types (ligne inférieure) de chaque population
Les énergies sont exprimées en électrons-volts et les distances en U. de réseau

ENSEMBLE	FER	CUIVRE (*)	MOLYBDENE	ARGENT	TUNGSTENE	OR
NOMBRE DE COLLISIONS						
555.58	770.28	374.52	639.14	501.14	562.74	485.64
133.42	55.04	41.36	36.49	47.01	40.17	56.06
NOMBRE D' ATOMES DEPLACES						
464.36	749.92	240.80	580.50	380.62	488.26	346.04
172.79	59.62	36.49	39.97	42.12	45.65	46.93
NOMBRE DE LACUNES CREEES						
84.61	85.36	76.14	95.36	77.72	94.16	78.92
9.34	5.07	4.09	5.21	5.92	5.58	5.38
NOMBRE DE REMPLACEMENTS ATOMIQUES						
379.68	664.64	164.62	485.08	302.90	393.72	267.12
168.38	57.66	37.42	40.35	42.77	47.53	48.39
NOMBRE DE SEQUENCES DE FOCALISATION						
23.52	47.80	6.32	31.34	18.02	23.22	14.42
13.76	4.91	2.31	3.49	3.18	3.43	3.52
PERTE D' ENERGIE PAR FROTTEMENTS ELECTRONIQUES						
37.16	39.82	57.56	31.92	31.75	30.31	31.61
9.89	2.30	2.66	2.04	1.91	2.13	2.05
ENERGIE CINETIQUE RESTANTE APRES L' ARRET DS ATOMES ENERGIQUES						
169.43	273.80	95.62	195.43	144.47	171.80	135.45
57.68	13.93	7.58	18.11	11.80	15.34	14.40
PERTE D' ENERGIE PAR TRANSMISSIONS D' ENERGIES INFERIEURES A L' ENERGIE SEUIL						
293.42	186.38	346.86	272.66	323.80	297.89	232.94
55.64	14.63	8.69	19.45	12.64	16.21	15.33
PERTE D' ENERGIE PAR REMPLACEMENTS ATOMIQUES						
51.51	46.18	47.94	67.13	56.12	39.89	58.83
48.82	39.38	25.43	82.73	38.41	30.17	47.74
NOMBRE TOTAL DE CHOCS QUASI-FRONTALX						
51.94	68.16	40.64	59.18	45.06	52.80	45.82
10.29	4.59	4.66	3.58	4.29	4.20	3.85
NOMBRE DE CHOCS QUASI-FRONTAUX SIMPLES						
17.82	13.54	20.08	18.40	16.88	19.06	18.94
4.24	3.11	4.20	3.65	3.95	3.40	3.54
NOMBRE DE DOUBLES CHOCS QUASI-FRONTAUX						
6.25	3.22	8.36	5.20	6.22	6.24	8.34
2.78	2.01	2.14	1.94	2.27	1.81	2.50

(*) POPULATION DE REFERENCE

Tableau V.8 (suite)

NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (110)						
20.02	36.32	10.20	21.80	20.82	14.02	16.96
9.16	4.65	3.14	3.79	3.10	4.77	3.61
NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (100)						
7.54	14.72	1.66	13.44	0.90	13.24	1.30
6.71	3.37	1.45	2.32	0.85	3.64	1.06
DISTANCE PARCOURUE PAR LE PREMIER ATOME FRAPPE						
2.51	2.59	2.95	2.55	2.35	2.47	2.16
0.96	0.80	1.07	0.90	0.94	0.90	0.91
PENETRATION DU PREMIER ATOME FRAPPE						
2.11	2.23	2.47	2.09	2.03	2.03	1.83
0.94	0.74	1.15	0.93	0.93	0.84	0.90
DEPLACEMENT LATERAL DU PREMIER ATOME FRAPPE						
1.22	1.18	1.42	1.33	1.07	1.26	1.04
0.58	0.52	0.61	0.57	0.51	0.68	0.50
PARCOURS LINEAIRE DU PREMIER ATOME FRAPPE						
3.03	3.07	3.54	3.15	2.77	3.04	2.62
1.04	0.89	1.11	0.95	0.96	1.11	0.97
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.25 U. RESEAU						
82.03	79.86	75.84	93.84	69.88	94.44	78.30
10.36	4.60	4.20	4.86	5.89	4.58	5.27
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.50 U. RESEAU						
56.64	71.84	43.02	66.26	48.18	61.20	49.32
11.27	4.51	4.35	4.17	3.80	5.09	3.25
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.75 U. RESEAU						
51.31	67.40	39.88	59.26	43.62	52.60	45.10
10.35	4.17	3.93	3.78	3.64	4.41	3.26
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.00 U. RESEAU						
44.05	62.30	32.30	53.46	33.48	48.48	34.28
12.04	4.32	3.73	3.77	3.32	3.89	3.18
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.25 U. RESEAU						
38.15	55.56	27.90	43.34	30.86	39.52	31.72
10.02	4.67	2.65	3.12	3.01	3.71	3.05
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.50 U. RESEAU						
35.55	54.50	24.84	41.48	28.00	36.36	28.10
10.77	4.47	2.85	3.38	3.02	3.66	3.15
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.75 U. RESEAU						
33.29	53.30	21.84	39.78	25.88	33.80	25.16
11.28	4.24	3.13	3.12	2.78	3.49	3.26
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.00 U. RESEAU						
31.82	52.38	20.62	37.86	24.72	31.62	23.74
11.33	4.44	2.96	3.08	2.77	3.82	3.14
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.25 U. RESEAU						
30.76	52.08	18.66	37.32	23.54	30.66	22.28
11.79	4.35	2.84	3.04	2.48	3.54	3.27

Tableau V.9

INFLUENCE DE LA TEMPERATURE DU CRISTAL

Moyennes (ligne supérieure) et écarts-types (ligne inférieure) de chaque population
Les énergies sont exprimées en électrons-volts et les distances en U. de réseau

ENSEMBLE	RS (*)	TEMPERATURES DU CRISTAL					
		15. K	50. K	100. K	30. K	725. K	
NOMBRE DE COLLISIONS							
	381.69	374.52	413.76	402.38	388.38	364.46	346.62
	42.30	41.36	39.19	43.22	36.66	28.60	19.51
NOMBRE D' ATOMES DEPLACES							
	215.67	240.80	244.72	236.46	218.84	186.66	166.54
	41.65	36.49	32.55	37.37	29.48	21.14	11.44
NOMBRE DE LACUNES CREEES							
	74.89	76.14	74.68	74.50	75.06	74.68	74.26
	4.03	4.09	3.63	3.74	3.93	4.45	4.01
NOMBRE DE REMPLACEMENTS ATOMIQUES							
	140.97	164.62	170.04	161.86	143.86	113.18	92.28
	41.65	37.42	33.00	38.08	30.10	20.74	11.80
NOMBRE DE SEQUENCES DE FOCALISATION							
	1.37	6.32	1.02	0.64	0.24	0.02	0.0
	2.49	2.31	1.05	0.74	0.43	0.14	0.0
PERTE D' ENERGIE PAR FROTTEMENTS ELECTRONIQUES							
	58.90	57.56	60.81	60.07	59.43	58.50	57.06
	3.63	2.66	3.81	3.95	3.00	3.31	3.34
ENERGIE CINETIQUE RESTANTE APRES L' ARRET DS ATOMES ENERGIQUES							
	89.34	95.62	84.07	84.05	86.29	92.83	93.16
	10.06	7.58	8.64	10.13	7.59	9.49	9.65
PERTE D' ENERGIE PAR TRANSMISSIONS D' ENERGIES INFERIEURES A L' ENERGIE SEUIL							
	351.76	346.86	355.12	355.88	354.27	348.55	349.85
	9.70	8.65	9.54	9.74	8.08	8.89	9.27
PERTE D' ENERGIE PAR REMPLACEMENTS ATOMIQUES							
	50.77	40.94	65.10	39.55	55.55	60.08	43.39
	53.01	25.43	82.94	23.06	44.34	74.47	26.39
NOMBRE TOTAL DE CHOCS QUASI-FRONTAUX							
	42.08	40.64	41.38	42.66	42.18	42.12	43.50
	4.15	4.66	3.94	4.24	3.93	3.86	3.57
NOMBRE DE CHOCS QUASI-FRONTAUX SIMPLES							
	20.41	20.08	19.78	20.38	20.26	19.78	22.20
	4.00	4.20	3.66	3.68	3.75	4.36	3.73
NOMBRE DE DOUBLES CHOCS QUASI-FRONTAUX							
	9.17	8.36	8.84	9.18	9.16	9.38	10.08
	2.66	2.14	2.56	3.10	2.69	2.24	2.78

(*) POPULATION DE REFERENCE

Tableau V.9 (suite)

NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (110)						
11.50	10.20	11.70	12.22	11.90	12.24	10.72
3.02	3.14	2.77	3.15	3.00	2.79	2.62
NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (100)						
0.89	1.66	0.94	0.74	0.86	0.72	0.44
1.00	1.45	0.93	0.84	0.82	0.72	0.54
DISTANCE PARCOURUE PAR LE PREMIER ATOME FRAPPE						
3.09	2.95	3.34	2.99	2.89	3.21	3.20
1.22	1.07	1.57	1.09	0.84	1.43	1.12
PENETRATION DU PREMIER ATOME FRAPPE						
2.65	2.47	2.87	2.58	2.47	2.69	2.81
1.20	1.15	1.50	1.12	0.84	1.39	1.02
DEPLACEMENT LATERAL DU PREMIER ATOME FRAPPE						
1.43	1.42	1.53	1.36	1.35	1.55	1.38
0.75	0.61	0.91	0.59	0.66	0.86	0.79
PARCOURS LINEAIRE DU PREMIER ATOME FRAPPE						
3.62	3.54	3.80	3.48	3.43	3.75	3.69
1.27	1.11	1.58	1.15	0.95	1.47	1.20
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.25 U. RESEAU						
73.96	75.84	74.36	73.88	74.68	73.64	71.36
4.24	4.20	3.60	3.69	4.05	4.45	4.02
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.50 U. RESEAU						
43.97	43.02	43.86	44.26	44.24	44.02	44.44
3.65	4.35	4.01	3.74	3.00	3.29	3.15
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.75 U. RESEAU						
40.36	39.88	40.46	40.98	40.54	40.08	40.22
3.52	3.93	3.75	3.50	3.33	3.45	2.95
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.00 U. RESEAU						
32.45	32.30	32.68	33.00	32.68	32.08	31.96
3.02	3.73	3.01	3.10	2.89	2.67	2.41
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.25 U. RESEAU						
28.33	27.90	28.66	28.66	29.12	28.04	27.60
2.73	2.65	2.80	2.80	2.51	2.79	2.50
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.50 U. RESEAU						
24.80	24.84	25.06	25.02	25.44	24.72	23.74
2.67	2.85	2.62	3.15	2.36	2.50	2.07
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.75 U. RESEAU						
21.55	21.84	21.86	21.36	22.06	21.62	20.58
2.47	3.13	2.30	2.73	2.10	2.32	1.66
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.00 U. RESEAU						
19.91	20.62	20.08	19.94	20.32	19.80	18.68
2.58	2.96	2.15	2.97	2.23	2.55	1.99
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.25 U. RESEAU						
17.95	18.66	18.20	18.22	17.82	17.84	16.94
2.67	2.84	1.85	2.70	3.44	2.38	2.17

Tableau V.10

INFLUENCE DE L'ORIENTATION DE L'IMPULSION INITIALE DU PREMIER ATOME FRAPPE

Moyennes (ligne supérieure) et écarts-types (ligne inférieure) de chaque population
Les énergies sont exprimées en électrons-volts et les distances en U. de réseau

POUR 15 K (DEUXIEME COLONNE) ET RS (TROISIEME COLONNE), LES IMPULSIONS INITIALES DES PREMIERS ATOMES FRAPPES SONT ORIENTEES ALEATOIREMENT					
ENSEMBLE(+)	15 K	RS (*)	(111)	(100)	(110)
(DANS UN RESEAU VIBRANT A 15 K)					
NOMBRE DE COLLISIONS					
	390.76	413.76	374.52	395.57	422.86
	58.17	39.19	41.36	21.23	48.34
NOMBRE D' ATOMES DEPLACES					
	238.73	244.72	240.80	227.00	249.29
	41.33	32.55	36.49	23.10	31.13
NOMBRE DE LACUNES CREEES					
	73.73	74.68	76.14	71.14	73.14
	10.14	3.63	4.09	3.76	3.98
NOMBRE DE REMPLACEMENTS ATOMIQUES					
	164.99	170.04	164.62	155.86	176.14
	37.65	33.00	37.42	22.74	31.30
NOMBRE DE SEQUENCES DE FOCALISATION					
	3.15	1.02	6.32	0.86	0.86
	3.09	1.05	2.31	0.64	0.83
PERTE D' ENERGIE PAR FROTTEMENTS ELECTRONIQUES					
	63.43	60.81	57.56	68.72	68.42
	31.03	3.81	2.66	3.27	4.01
ENERGIE CINETIQUE RESTANTE APRES L' ARRET DS ATOMES ENERGIQUES					
	90.34	84.07	95.62	78.16	80.36
	33.96	8.64	7.58	8.72	5.17
PERTE D' ENERGIE PAR TRANSMISSIONS D' ENERGIES INFERIEURES A L' ENERGIE SEUIL					
	346.25	355.12	346.86	353.12	351.22
	39.83	9.54	8.69	8.26	7.65
PERTE D' ENERGIE PAR REMPLACEMENTS ATOMIQUES					
	73.68	65.10	40.94	41.34	250.94
	111.91	82.94	25.43	25.49	216.62
NOMBRE TOTAL DE CHOCS QUASI-FRONTALX					
	40.33	41.38	40.64	40.71	43.00
	6.70	3.94	4.66	3.61	4.14
NOMBRE DE CHOCS QUASI-FRONTALX SIMPLES					
	19.56	19.78	20.08	18.57	20.71
	4.56	3.66	4.20	2.56	2.66
NOMBRE DE DOUBLES CHOCS QUASI-FRONTALX					
	8.45	8.84	8.36	9.71	8.14
	2.65	2.56	2.14	1.28	2.47

(+) AVEC LES TROIS FOCALISATIONS DANS UN RESEAU SUPPOSE STATIQUE
(*) POPULATION DE REFERENCE

Tableau V.10 (suite)

NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (110)	10.93	11.70	10.20	11.71	12.86	11.57
	3.31	2.77	3.14	2.19	2.36	3.33
NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (100)	1.19	0.94	1.66	0.71	1.29	0.29
	1.23	0.92	1.45	0.70	1.28	0.45
DISTANCE PARCOURUE PAR LE PREMIER ATOME FRAPPE	2.78	3.34	2.95	1.84	1.05	0.96
	1.45	1.57	1.07	0.14	0.21	0.41
PENETRATION DU PREMIER ATOME FRAPPE	2.38	2.87	2.47	1.77	1.06	0.67
	1.37	1.50	1.15	0.10	0.32	0.09
DEPLACEMENT LATERAL DU PREMIER ATOME FRAPPE	1.27	1.52	1.42	0.50	0.32	0.59
	0.82	0.91	0.61	0.19	0.30	0.53
PARCOURS LINEAIRE DU PREMIER ATOME FRAPPE	3.25	3.80	3.54	2.13	1.19	1.18
	1.53	1.58	1.11	0.20	0.34	0.54
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.25 U. RESEAU	73.39	74.36	75.84	70.29	72.86	73.86
	10.13	3.60	4.20	4.06	3.64	3.04
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.50 U. RESEAU	42.65	43.86	43.02	42.00	44.71	44.00
	6.93	4.01	4.35	3.93	5.72	1.93
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.75 U. RESEAU	39.43	40.46	39.88	39.86	40.86	40.29
	6.37	3.79	3.93	4.19	3.64	1.28
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.00 U. RESEAU	32.03	32.68	32.30	32.71	32.57	34.57
	5.26	3.01	3.73	3.06	2.82	3.02
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.25 U. RESEAU	27.96	28.66	27.90	28.71	28.86	29.00
	4.46	2.80	2.65	2.76	2.23	2.93
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.50 U. RESEAU	24.52	25.06	24.84	24.57	26.00	24.57
	4.06	2.63	2.85	2.56	2.83	1.05
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.75 U. RESEAU	21.43	21.86	21.84	21.43	22.86	20.57
	3.77	2.30	2.13	2.19	3.00	0.90
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.00 U. RESEAU	19.95	20.08	20.62	20.57	21.00	19.00
	3.54	2.15	2.96	2.19	2.39	0.53
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.25 U. RESEAU	18.14	18.20	18.66	19.14	19.86	17.00
	3.29	1.89	2.84	2.23	2.29	1.31

Tableau V.11

VALEURS DES FACTEURS CORRECTIFS POUR ADAPTER
NOS RESULTATS AVEC LA FORMULE DE NIELSEN

Irradiations	Irradiation de la face [100]	Départ d'un site de réseau	Départ d'un site de réseau
Température (°K)	723	723	RS
Pouvoir d'arrêt (eV/Å)	281	770	950
Facteur correctif parcours total	2.98	1.09	0.88
distance parcourue	2.85	0.95	0.78
pénétration	2.81	0.82	0.71

RS : réseau statique

Tableau V.12

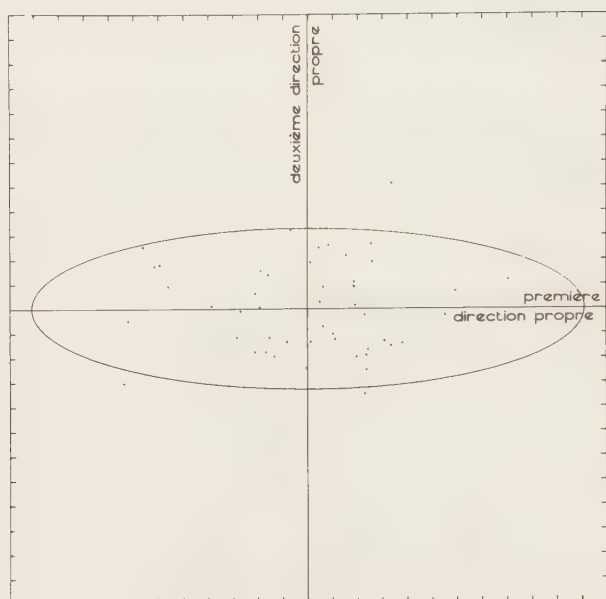
PARCOURS D'ATOMES Cu CANALISES DANS DU CUIVRE

Directions <hkl>	<001>	<114>	<112>	<111>
ρ_{hkl} (unité de réseau) ⁻²	2.	3.75	2.45	3.46
Cuivre à 723 °K				
parcours total	378	166	447	155
distance parcourue	356	140	420	131
pénétration	350	116	340	74
Cuivre en RS				
parcours total	1 382	171	1 480	222
distance parcourue	1 365	148	1 465	200
pénétration	1 360	126	1 200	113

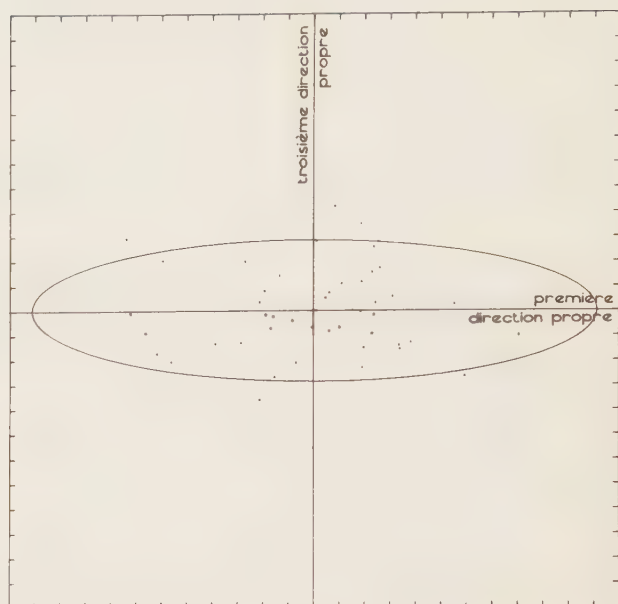
Tableau V.13

VALEURS DES PARAMETRES DU MODELE DE CREATION DES DEFAUTS

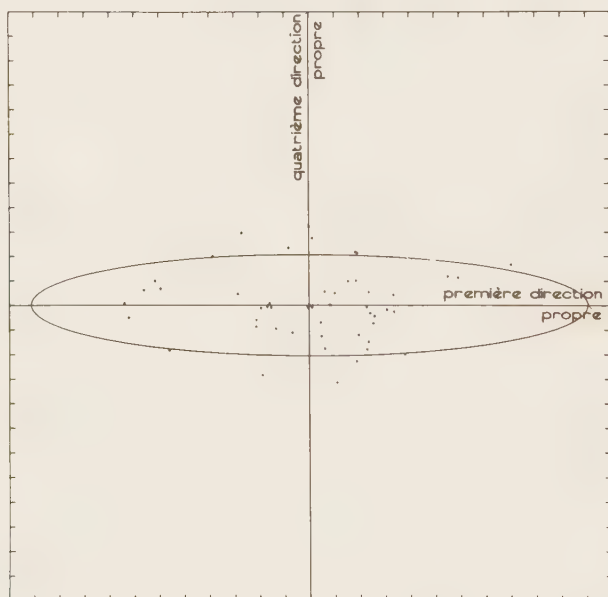
	Moyennes	Incertitudes	Erreurs calculées
π_1	0,676	0,031	0,061
π_2	0,324	0,031	0,036
π_3	0	-	-
Λ_a (U. Réseau)	3,12	0,18	0,58
Λ_b (U. Réseau)	11,10	1,06	0,96



(a)



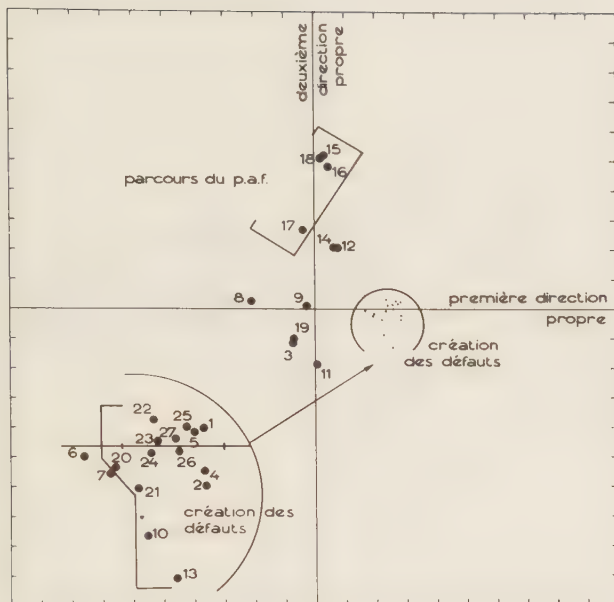
(b)



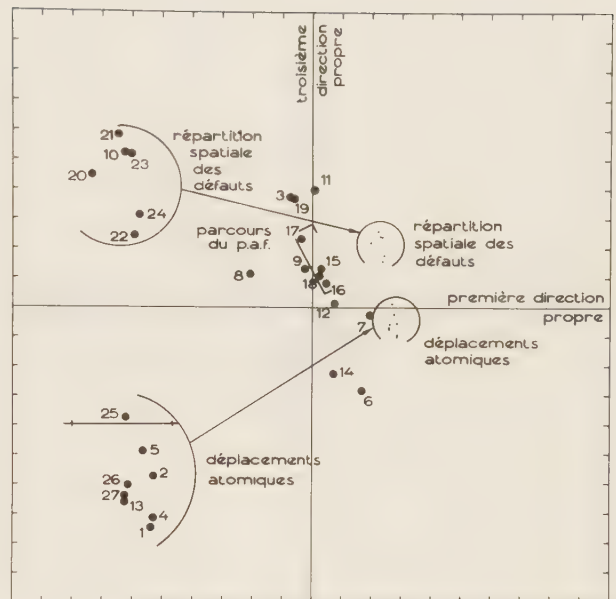
(c)

Figure V-1

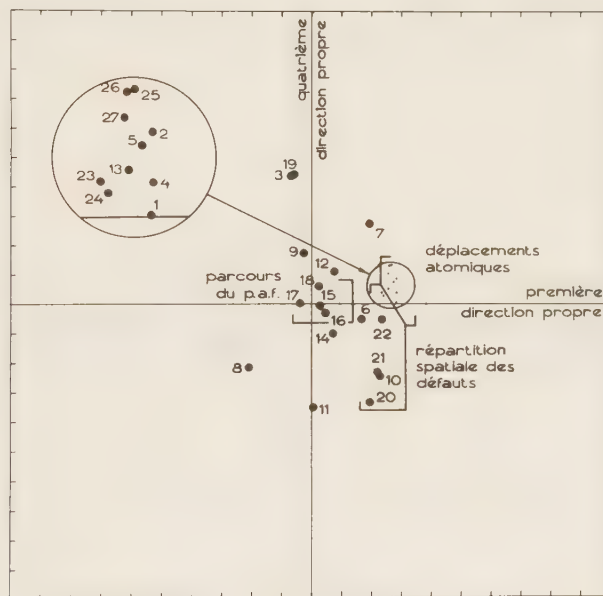
Population de référence
 Projection sur les trois premiers plans principaux du nuage de points
 représentant les cascades
 Chaque graduation représente une unité de distance euclidienne
 Les ellipses représentent les projections des ellipsoïdes d'inertie
 du nuage de points



(a)



(b)



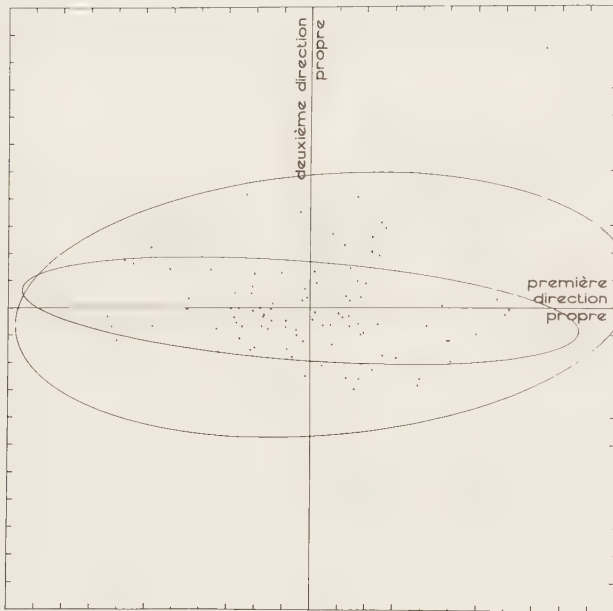
(c)

Figure V-2

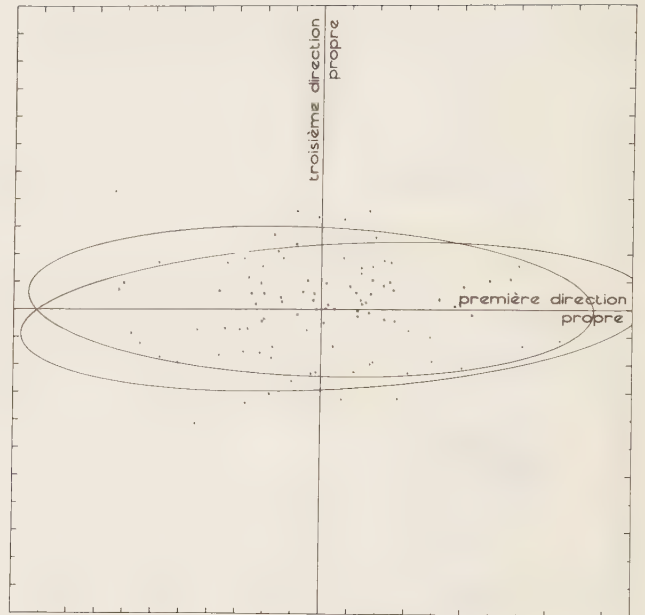
Population de référence

Projection sur les trois premiers plans principaux des vecteurs
représentant les paramètres étudiés

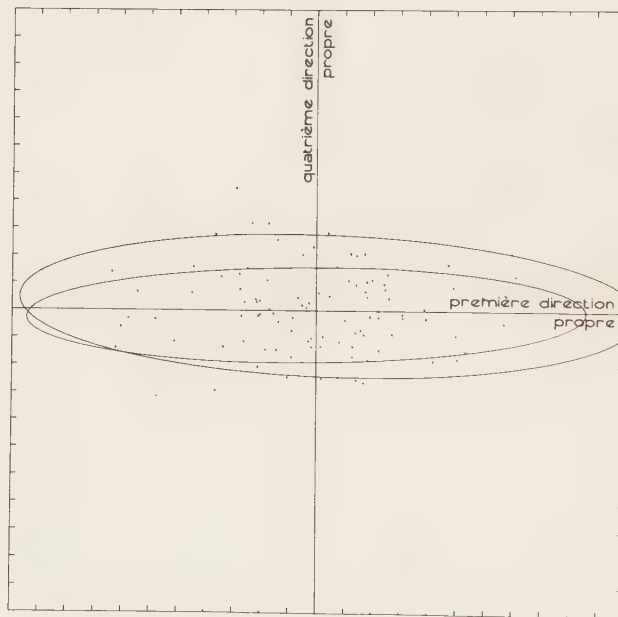
Chaque graduation représente un dixième d'unité de distance
euclidienne. Les numéros désignent les paramètres correspondants
indiqués en annexe II



(a)



(b)

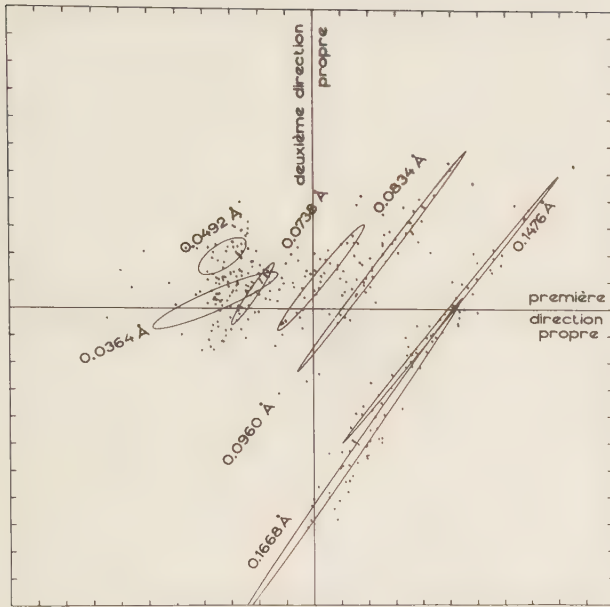


(c)

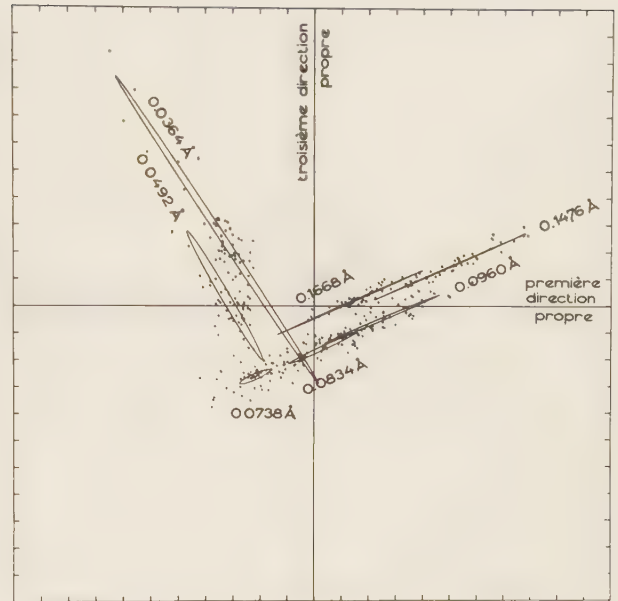
Figure V-3

Comparaison de deux populations ayant les mêmes caractéristiques que la population de référence mais initialisées différemment
Projection sur les trois premiers plans principaux du nuage de points représentant les cascades

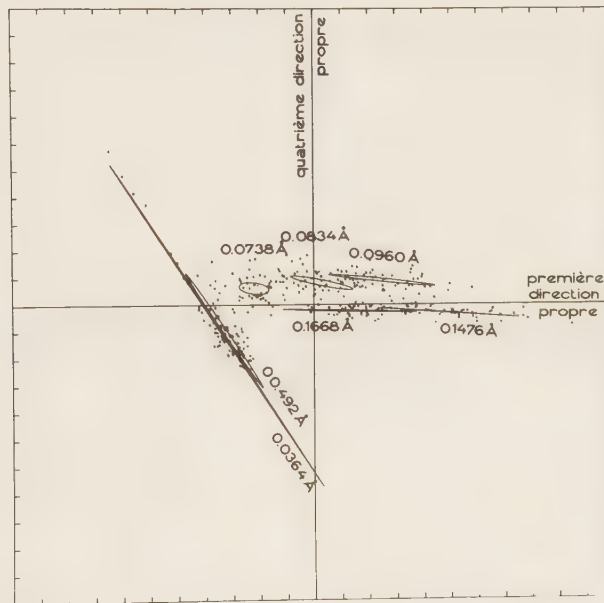
Chaque graduation représente une unité de distance euclidienne
Les ellipses représentent les projections des ellipsoïdes d'inertie de chaque population



(a)



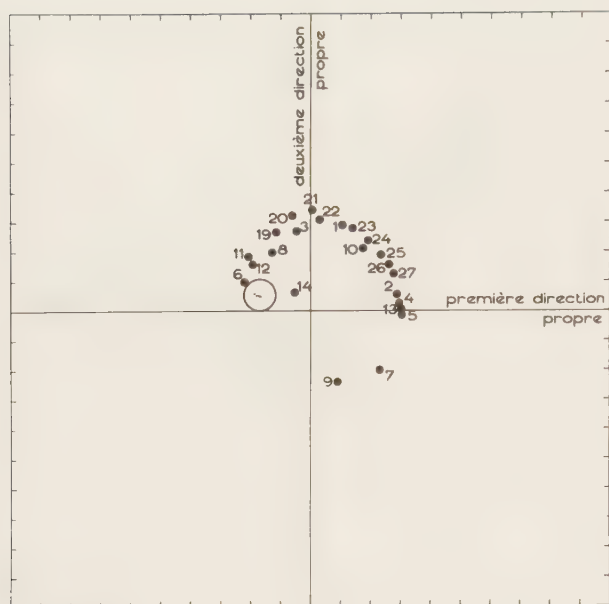
(b)



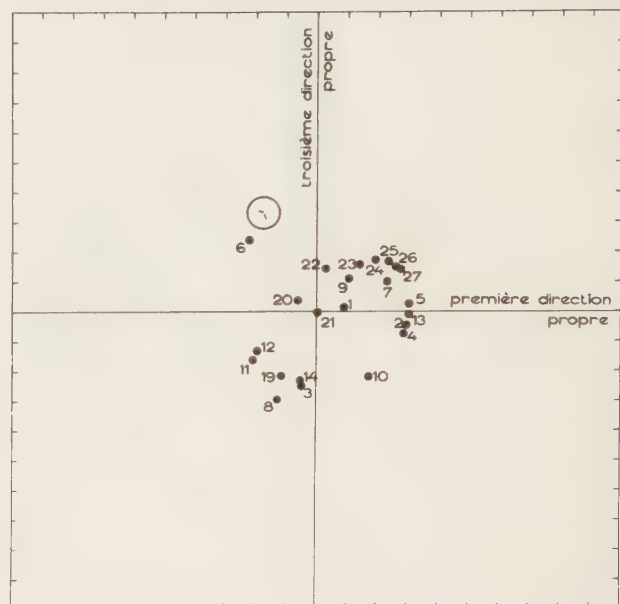
(c)

Figure V-4

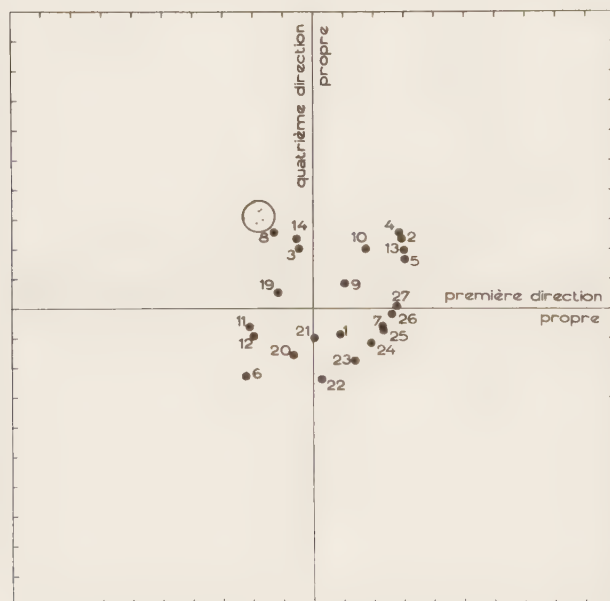
Influence du modèle de potentiel interatomique
 Projection sur les trois premiers plans principaux du nuage de
 points représentant les cascades
 Chaque graduation représente une unité de distance euclidienne
 Les ellipses représentent les projections des ellipsoïdes d'inertie
 de chaque population



(a)



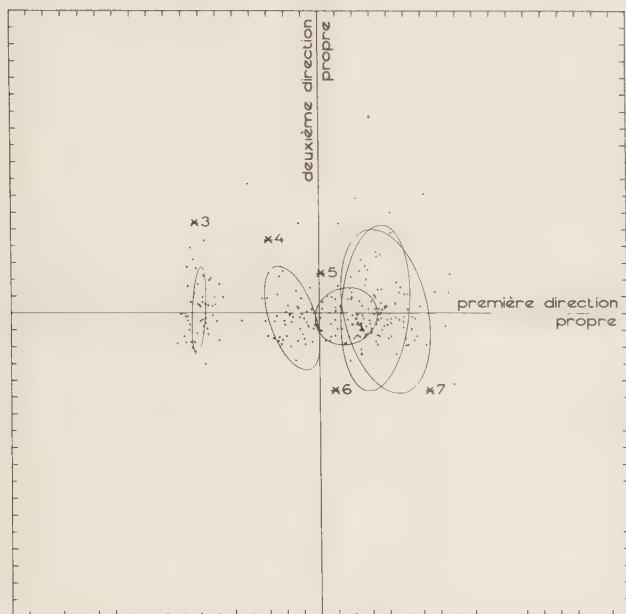
(b)



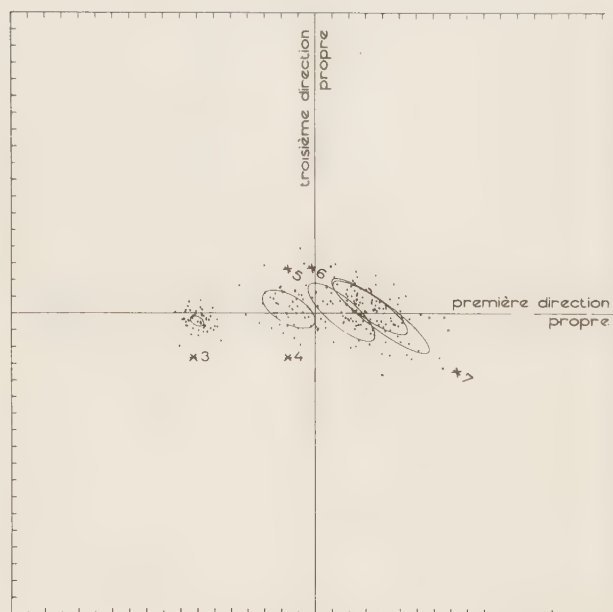
(c)

Figure V-5

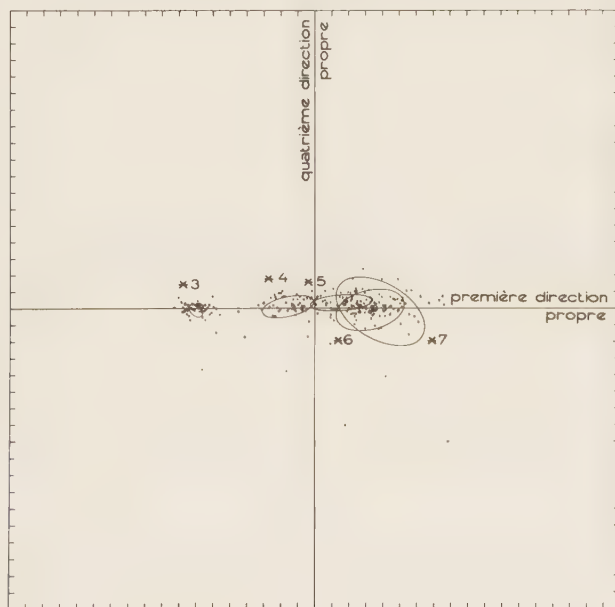
Influence du modèle de potentiel interatomique
Projection sur les trois premiers plans principaux des vecteurs
représentant les paramètres étudiés
Chaque graduation représente un dixième d'unité de distance
euclidienne. Les numéros désignent les paramètres correspondants
indiqués en annexe II. Les points à l'intérieur du cercle
représentent les paramètres qui ne sont pas numérotés



(a)



(b)

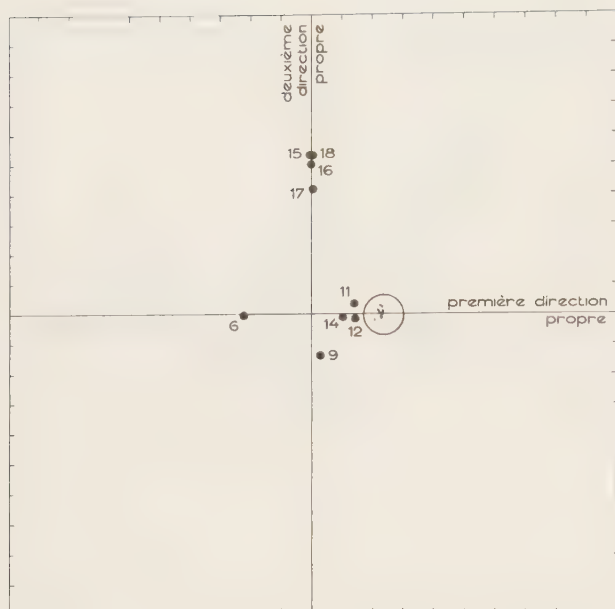


(c)

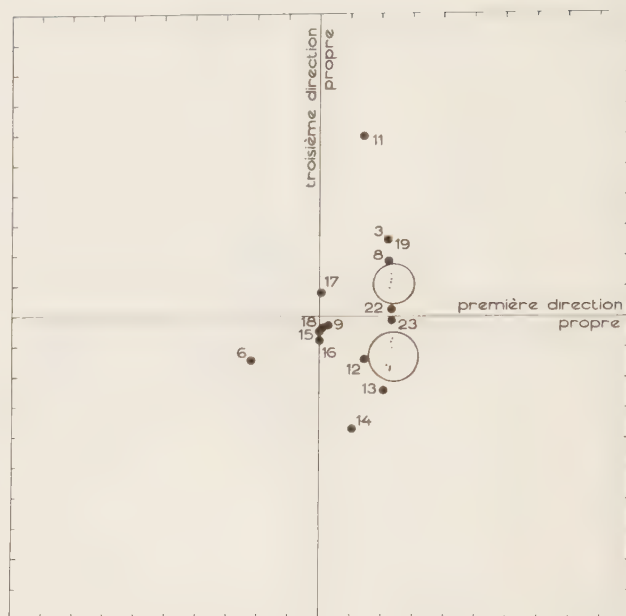
Figure V-6

Influence du modèle de frottements électroniques
Projection sur les trois premiers plans principaux du nuage de points
représentant les cascades

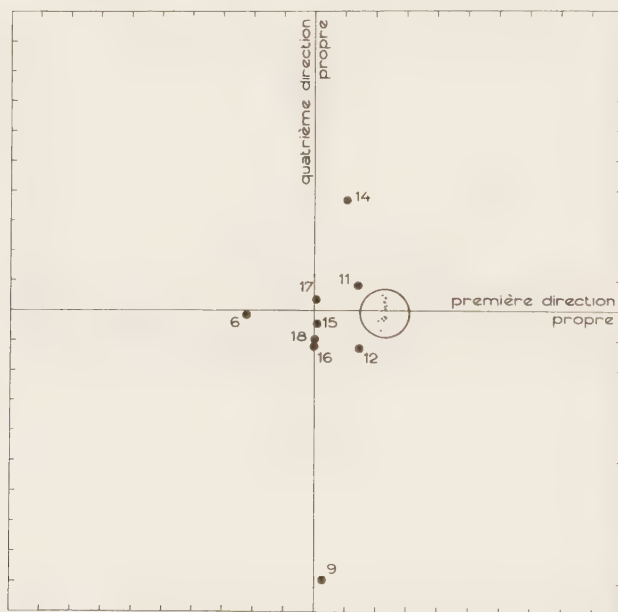
Chaque graduation représente une unité de distance euclidienne
Les ellipses représentent les ellipsoïdes d'inertie
de chaque population



(a)



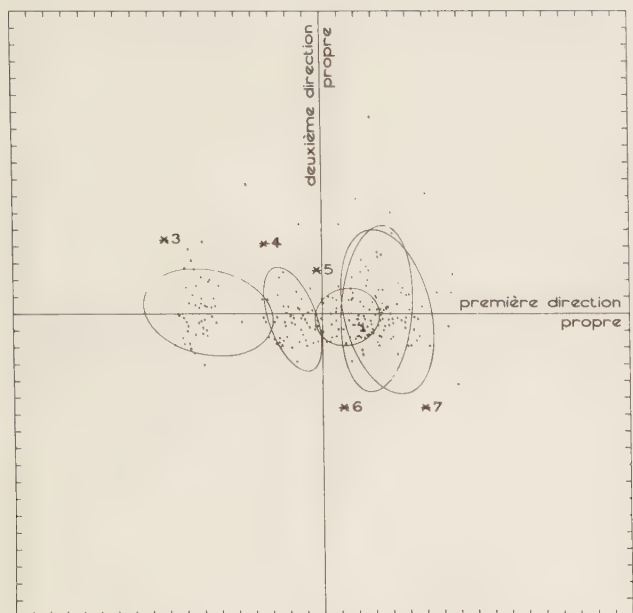
(b)



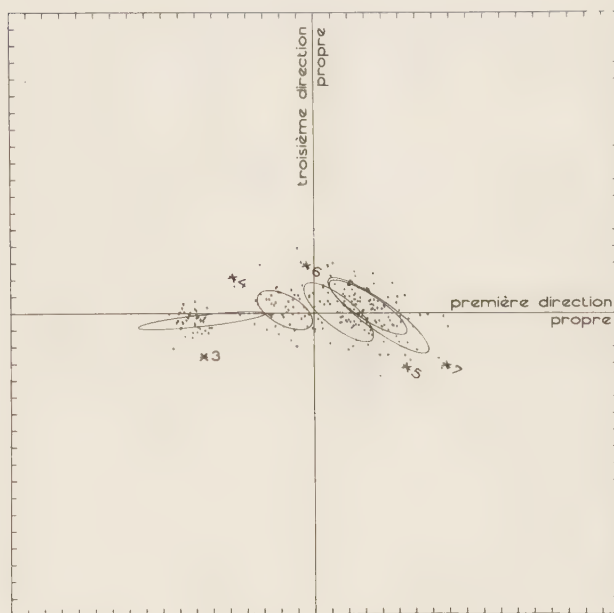
(c)

Figure V-7

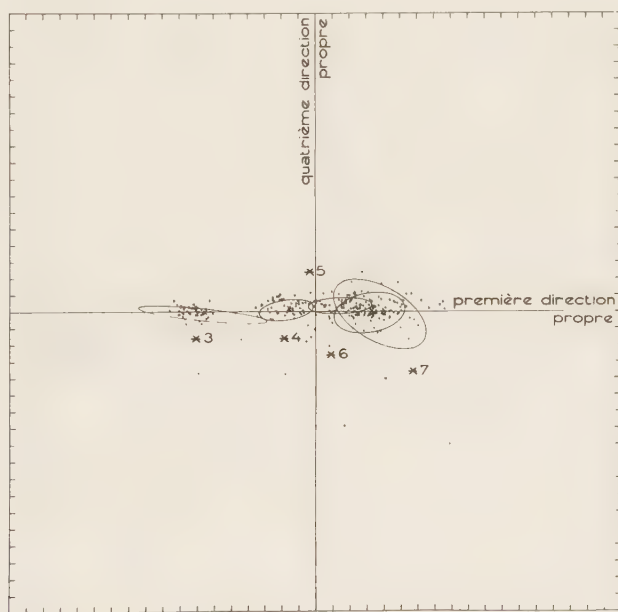
Influence du modèle de frottements électroniques
Projection sur les trois premiers plans principaux des vecteurs
représentant les paramètres étudiés
Chaque graduation représente un dixième d'unité de distance
euclidienne. Les numéros désignent les paramètres correspondants
indiqués en annexe II. Les points à l'intérieur du cercle
représentent les paramètres qui ne sont pas numérotés



(a)



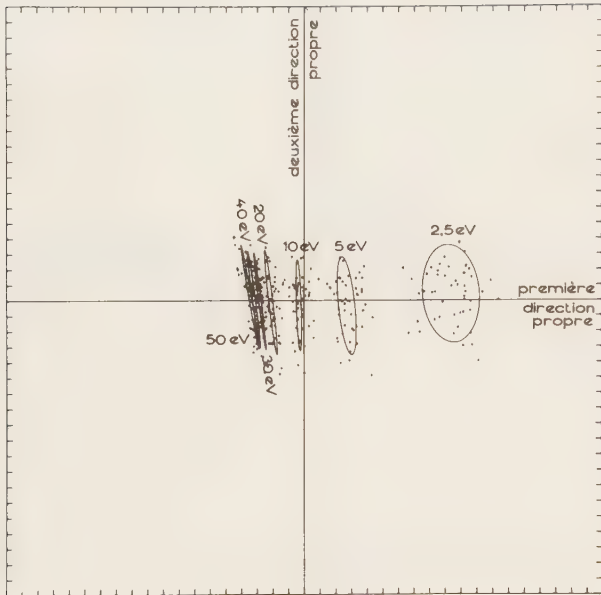
(b)



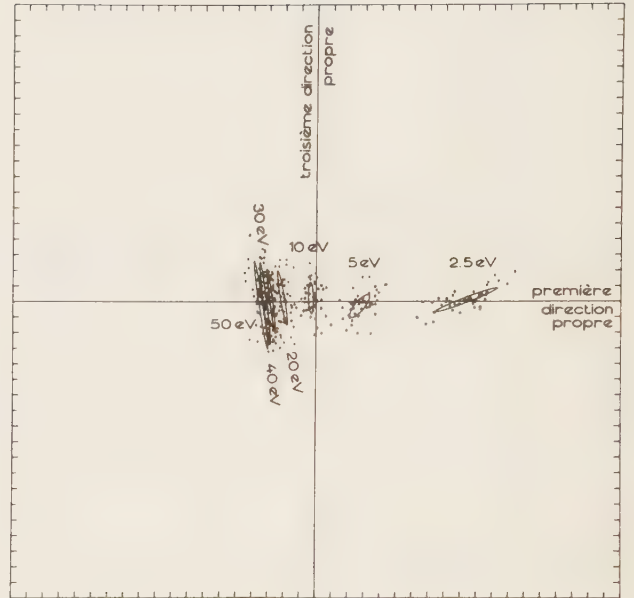
(c)

Figure V-8

Influence du modèle de frottements électroniques avec les
modifications de paramètres indiquées dans le texte
Projection sur les trois premiers plans principaux du nuage de
points représentant les cascades
Chaque graduation représente une unité de distance euclidienne
Les ellipses représentent les projections des ellipsoïdes d'inertie
de chaque population



(a)



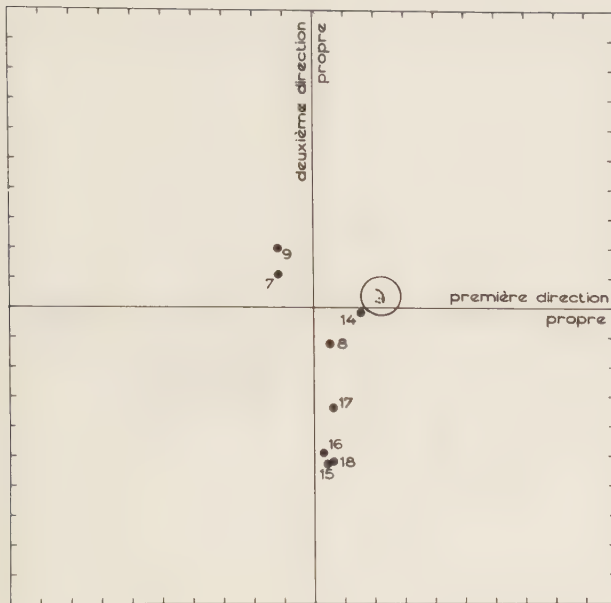
(b)



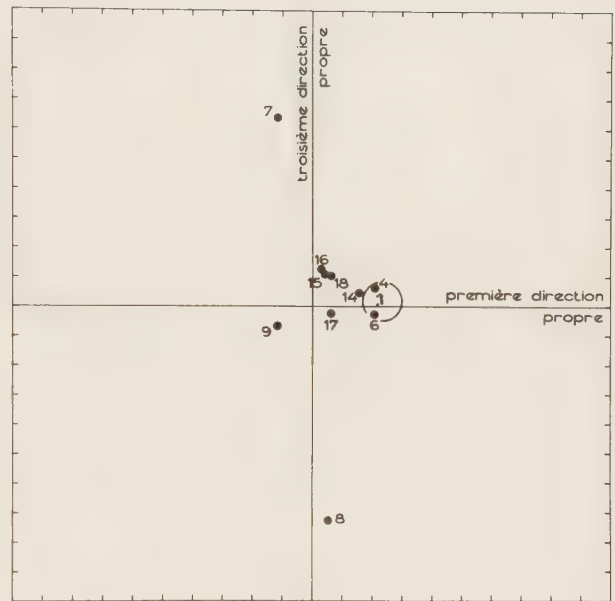
(c)

Figure V-9

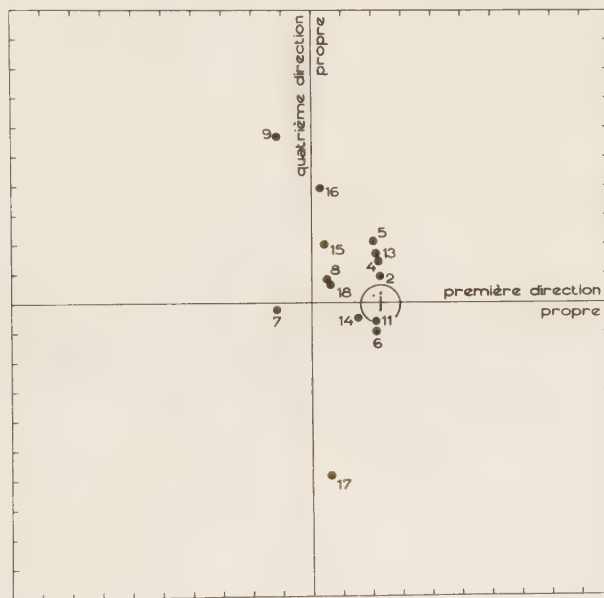
Influence de l'énergie seuil de déplacements
Projection sur les trois premiers plans principaux du nuage de points représentant les cascades
Chaque graduation représente une unité de distance euclidienne
Les ellipses représentent les projections des ellipsoïdes d'inertie de chaque population



(a)



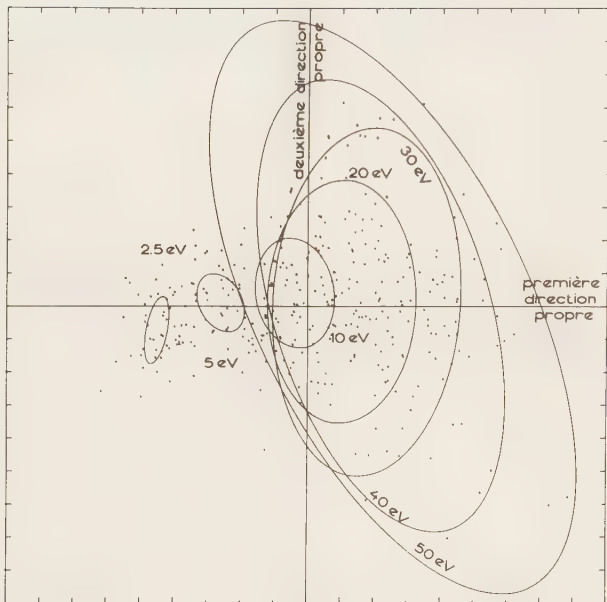
(b)



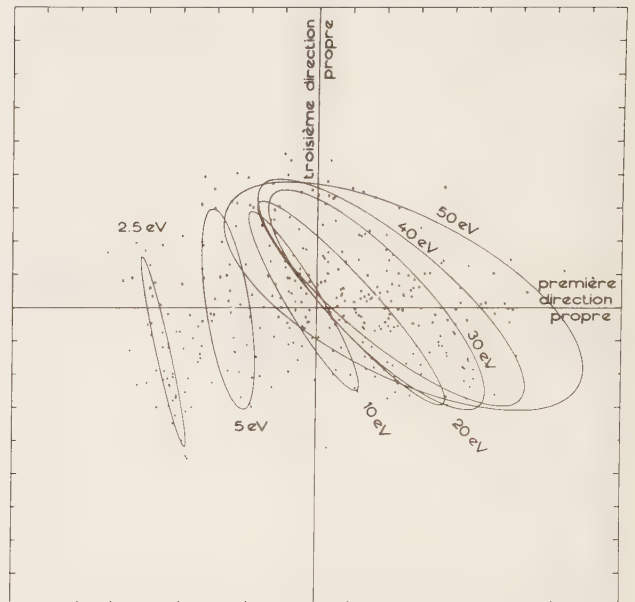
(c)

Figure V-10

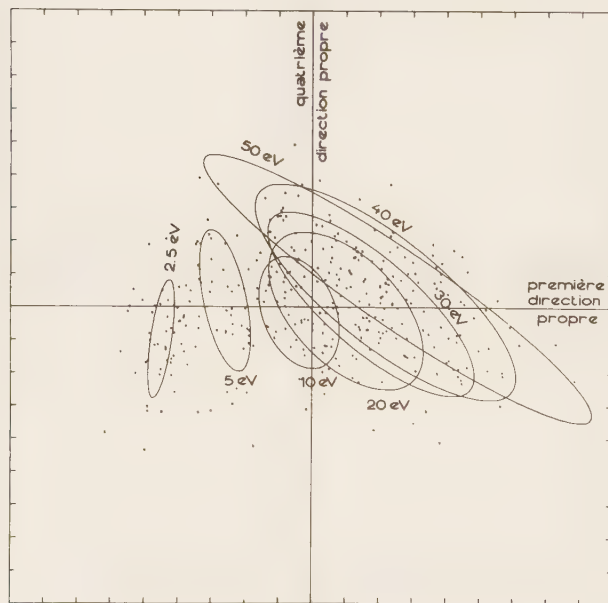
Influence de l'énergie seuil de déplacements
Projection sur les trois premiers plans principaux des vecteurs
représentant les paramètres étudiés
Chaque graduation représente un dixième d'unité de distance
euclidienne. Les numéros désignent les paramètres correspondants
indiqués en annexe II. Les points à l'intérieur du cercle
représentent les paramètres qui ne sont pas numérotés



(a)



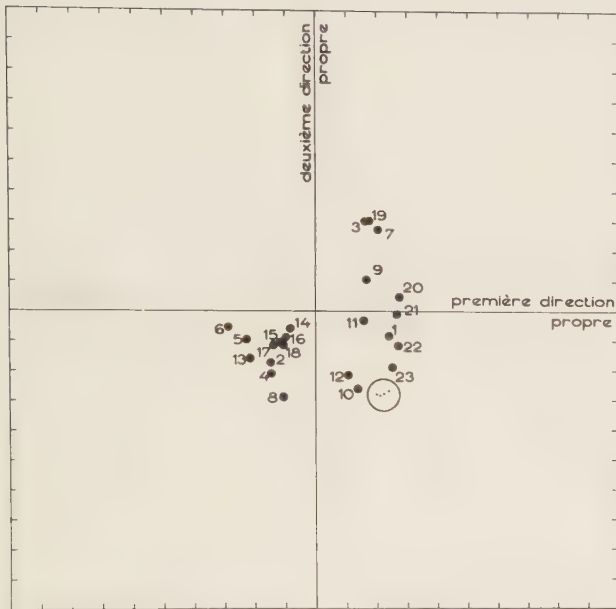
(b)



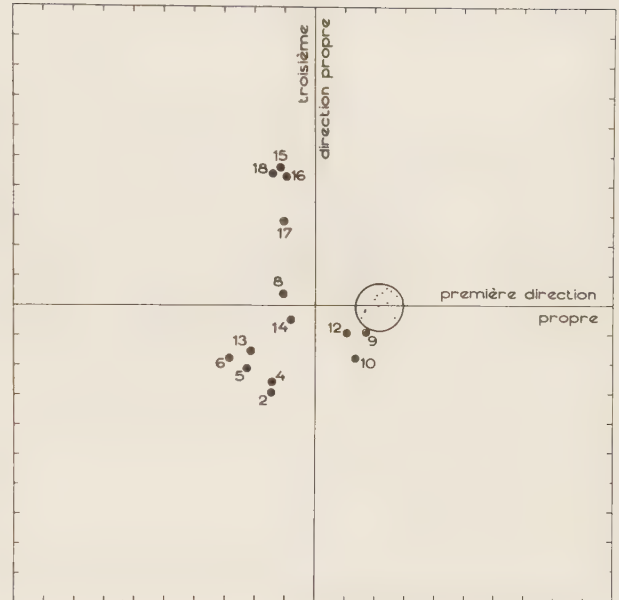
(c)

Figure V-11

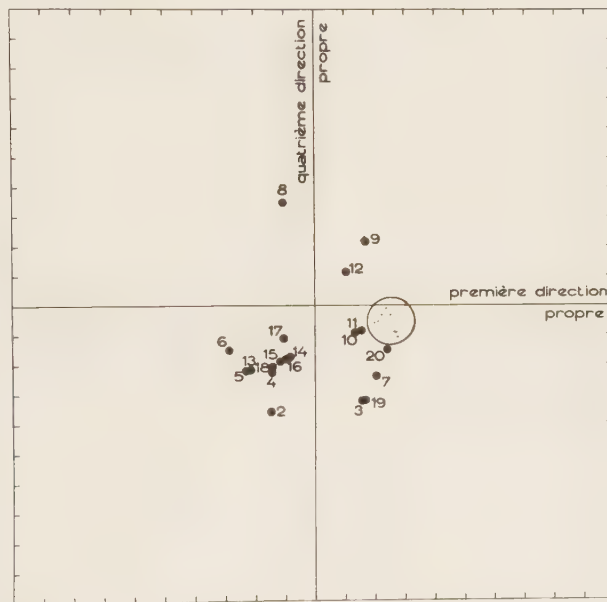
Influence de l'énergie seuil de déplacements avec les modifications
de paramètres indiquées dans le texte
Projections sur les trois premiers plans principaux du nuage de points
représentant les cascades
Chaque graduation représente une unité de distance euclidienne
Les ellipses représentent les projections des ellipsoïdes d'inertie
de chaque population



(a)



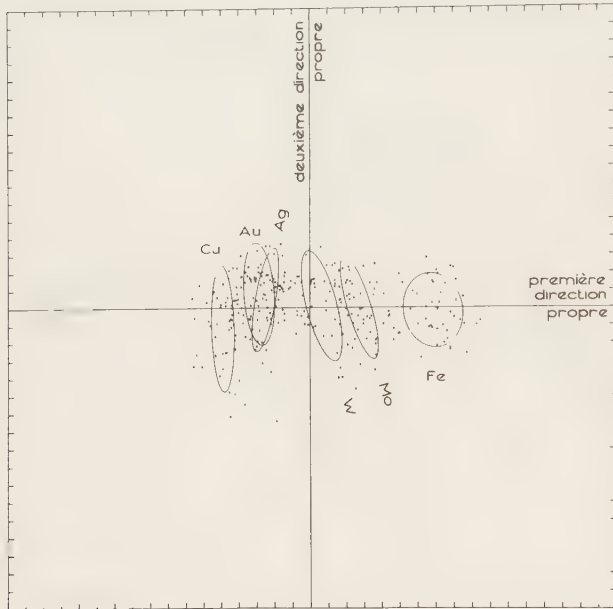
(b)



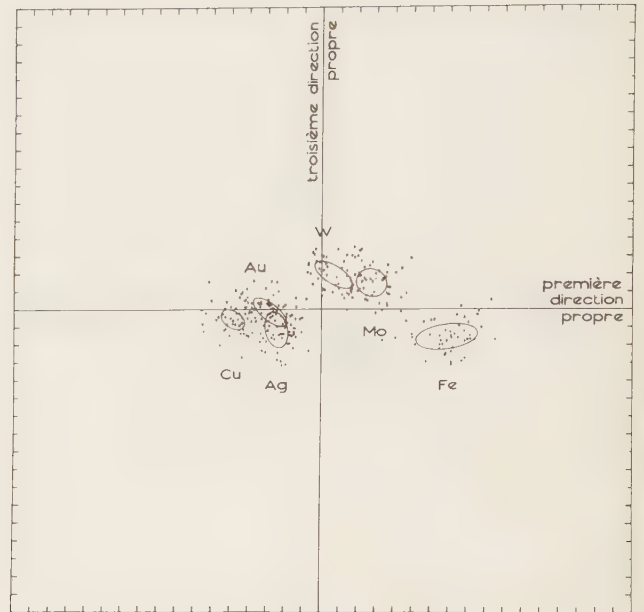
(c)

Figure V-12

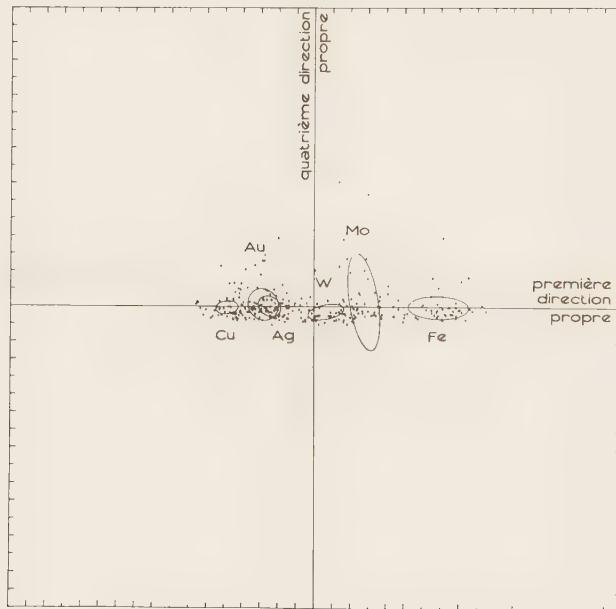
Influence de l'énergie seuil de déplacements avec les modifications
de paramètres indiquées dans le texte
Projection sur les trois premiers plans principaux des vecteurs
représentant les paramètres étudiés
Chaque graduation représente un dixième d'unité de distance
euclidienne. Les numéros désignent les paramètres correspondants
indiqués en annexe II. Les points à l'intérieur du cercle
représentent les paramètres qui ne sont pas numérotés



(a)



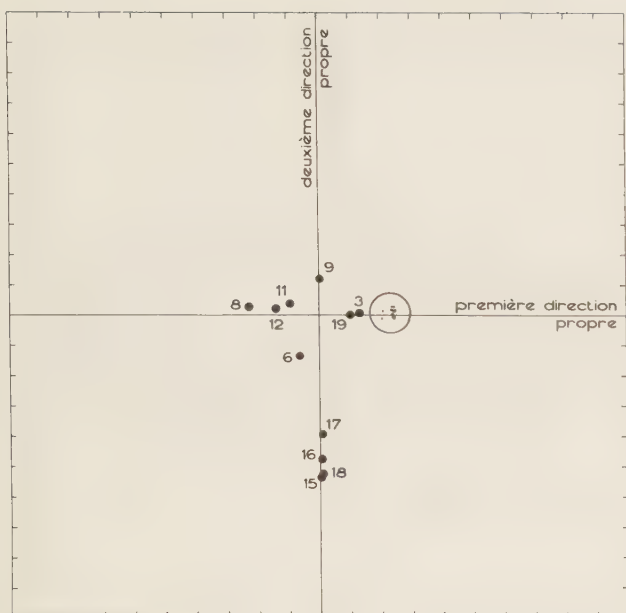
(b)



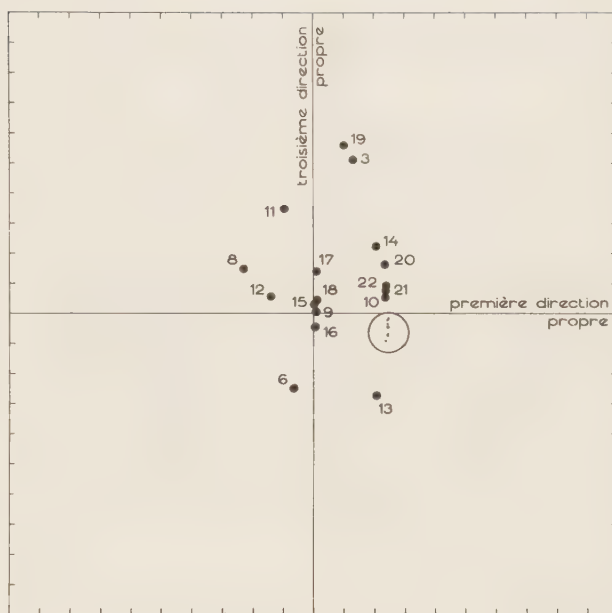
(c)

Figure V-13

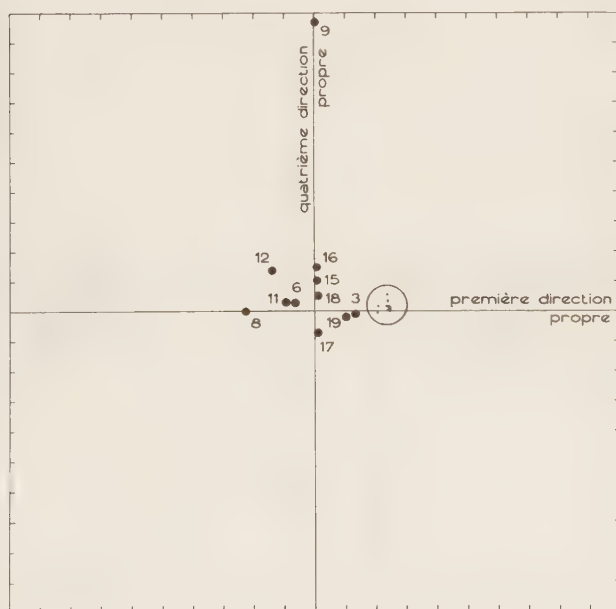
Influence de la nature du solide irradié
Projection sur les trois premiers plans principaux du nuage de
points représentant les cascades
Chaque graduation représente une unité de distance euclidienne
Les ellipses représentent les projections des ellipsoïdes d'inertie
de chaque population



(a)



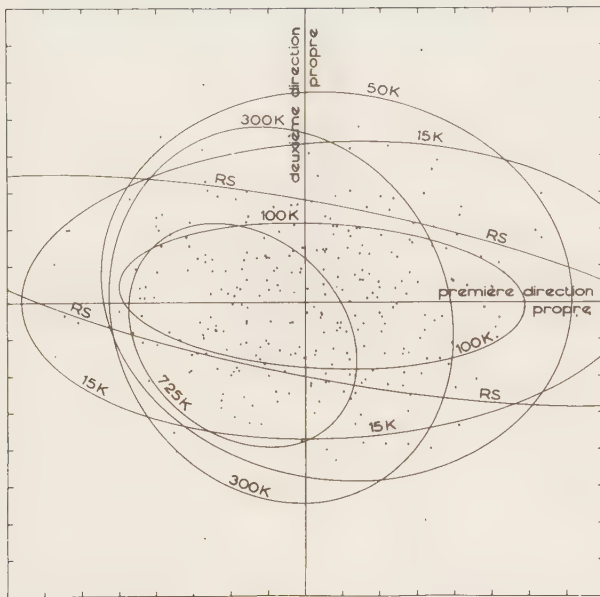
(b)



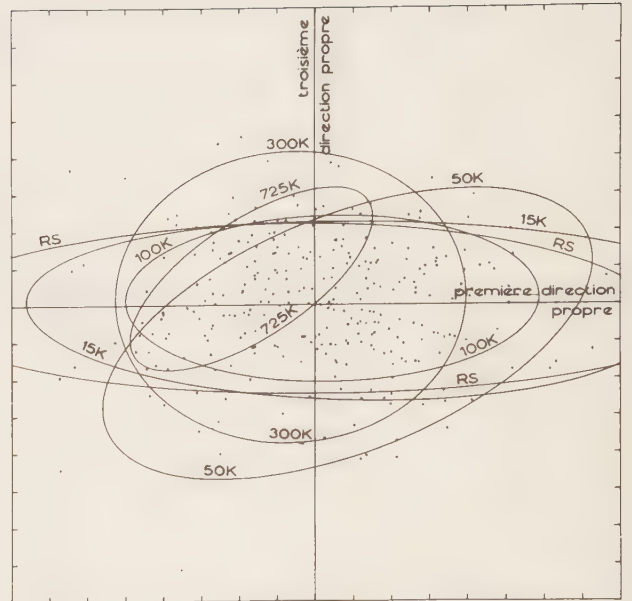
(c)

Figure V-14

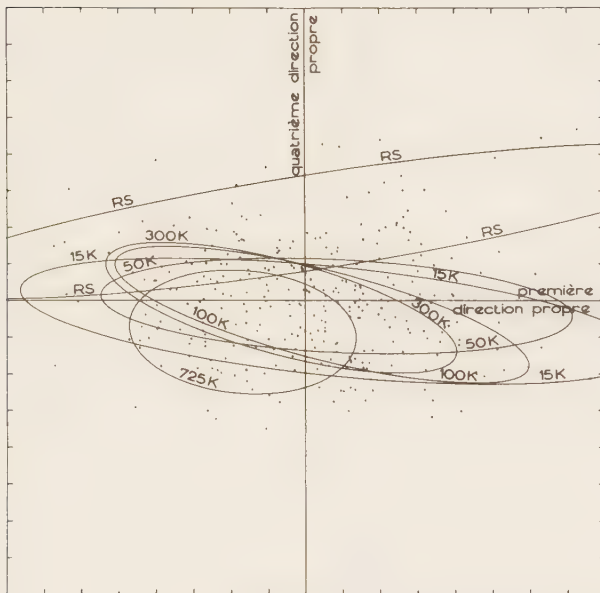
Influence de la nature du solide irradié
Projection sur les trois premiers plans principaux des vecteurs
représentant les paramètres étudiés
Chaque graduation représente un dixième d'unité de distance
euclidienne. Les numéros désignent les paramètres correspondants
indiqués en annexe II. Les points à l'intérieur du cercle
représentent les paramètres qui ne sont pas numérotés



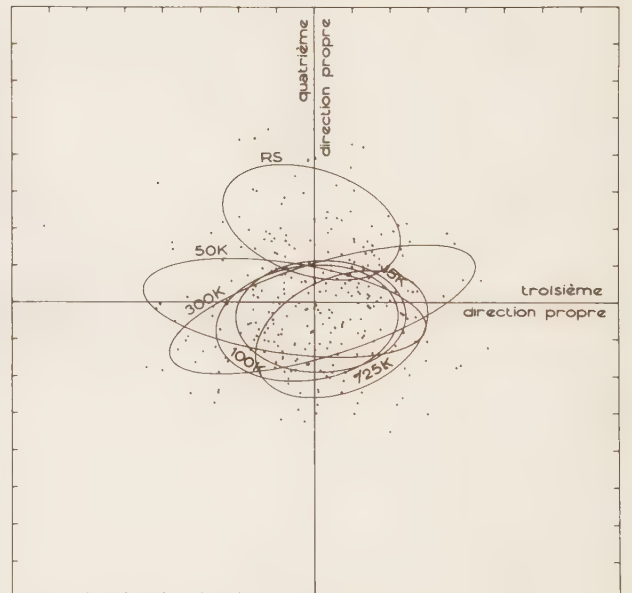
(a)



(b)



(c)



(d)

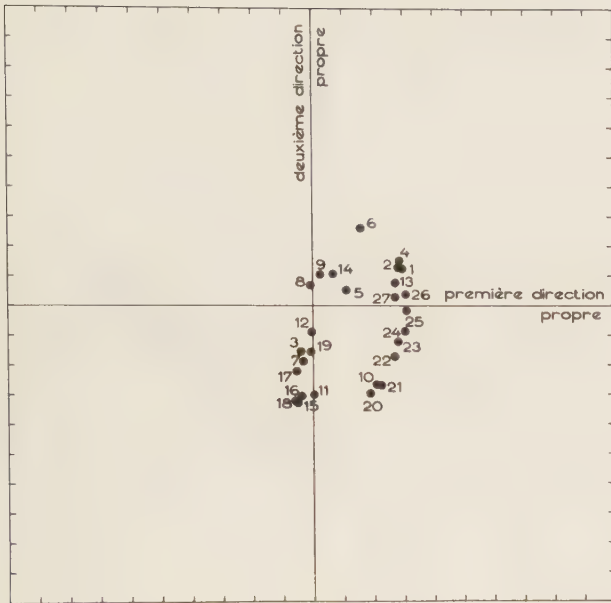
Figure V-15

Influence de la température du cristal

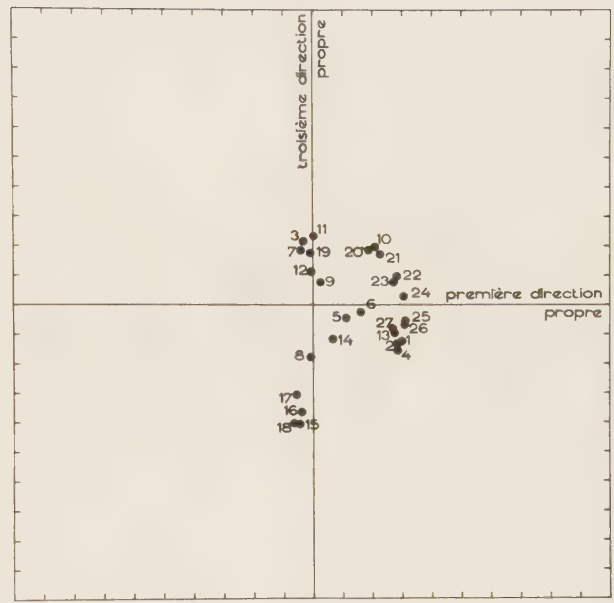
Projection sur les trois premiers plans principaux et le plan principal formé par les troisième et quatrième directions propres du nuage de points représentant les cascades

Chaque graduation représente une unité de distance euclidienne

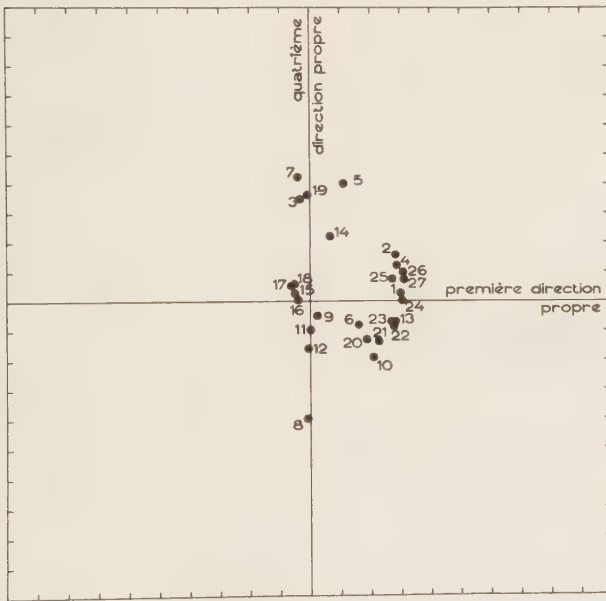
Les ellipses représentent les projections des ellipsoïdes d'inertie de chaque population



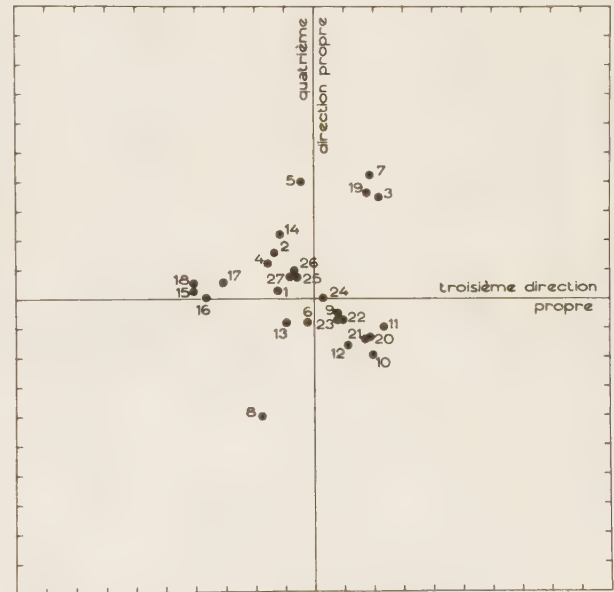
(a)



(b)



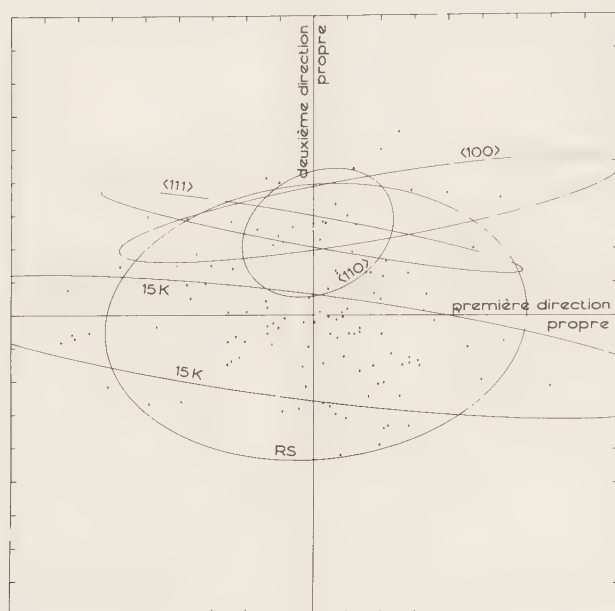
(c)



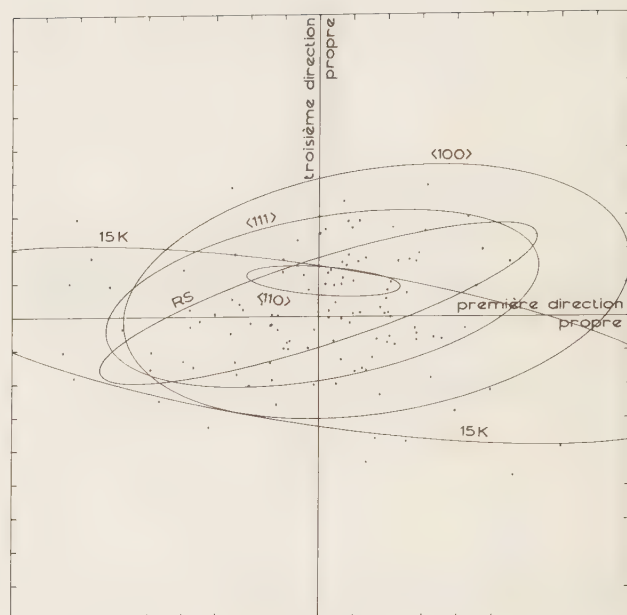
(d)

Figure V-16

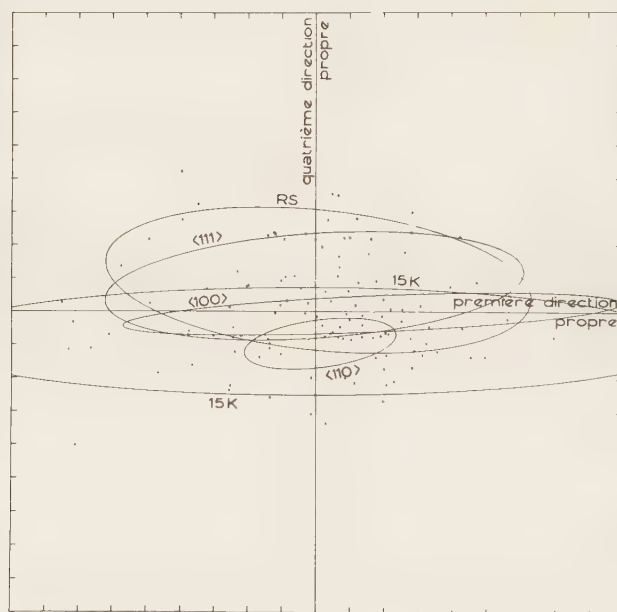
Influence de la température du cristal
 Projection sur les trois premiers plans principaux et le plan
 principal formé par les troisième et quatrième directions proposées
 des vecteurs représentant les paramètres étudiés
 Chaque graduation représente un dixième d'unité de distance euclidienne
 Les numéros désignent les paramètres correspondants indiqués
 en annexe II



(a)



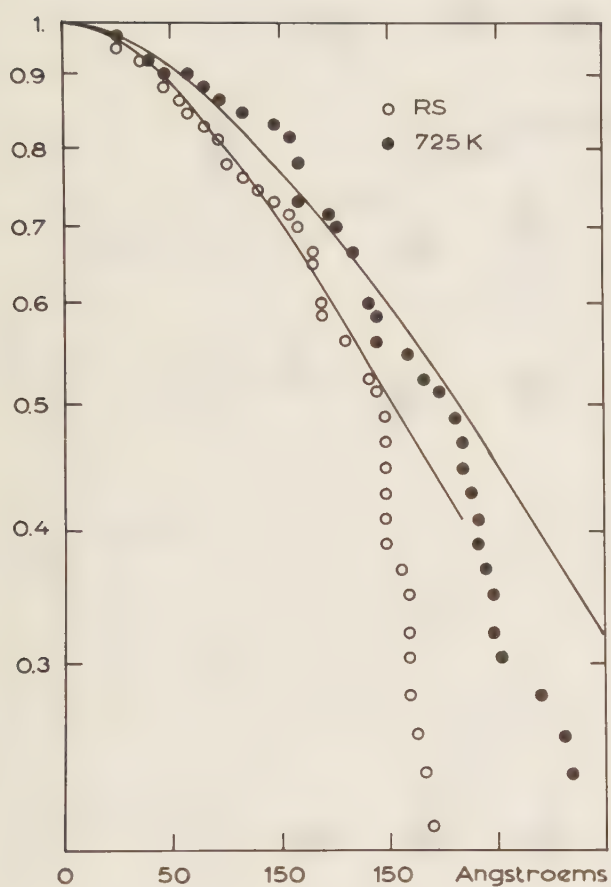
(b)



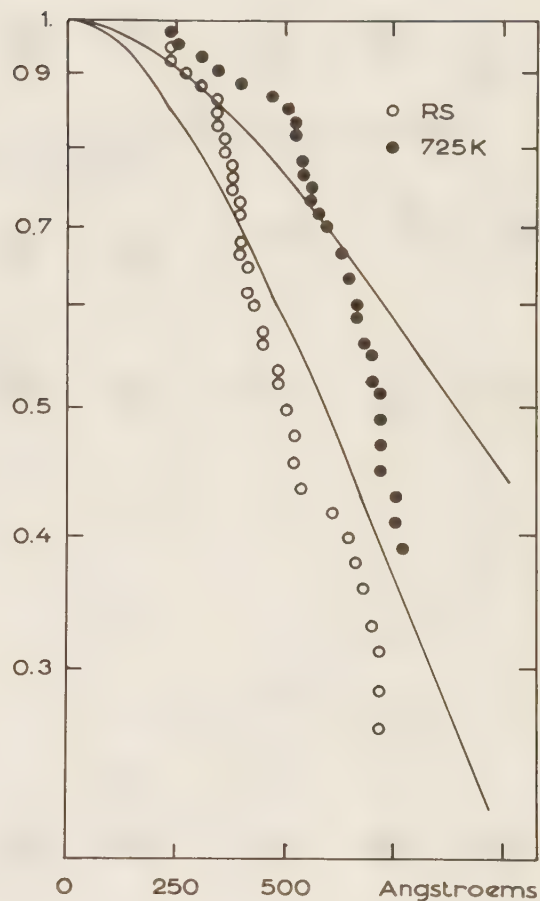
(c)

Figure V-17

Influence de l'orientation de l'impulsion initiale du premier atome frappé.
 Projection sur les trois premiers plans principaux du nuage de points
 représentant les cascades
 Chaque graduation représente une unité de distance euclidienne
 Les ellipses représentent les projections des ellipsoïdes d'inertie
 de chaque population



(a)



(b)

Figure V-18

Distribution statistique des parcours linéaires des atomes du cuivre
Ces atomes quittent leur site de réseau avec une impulsion initiale
correspondant à 125 keV dans une direction choisie aléatoirement
Le modèle de potentiel utilisé est le modèle MOL 2 (cf. annexe I)
et le modèle de frottements électroniques est celui de FIRSOV [57]

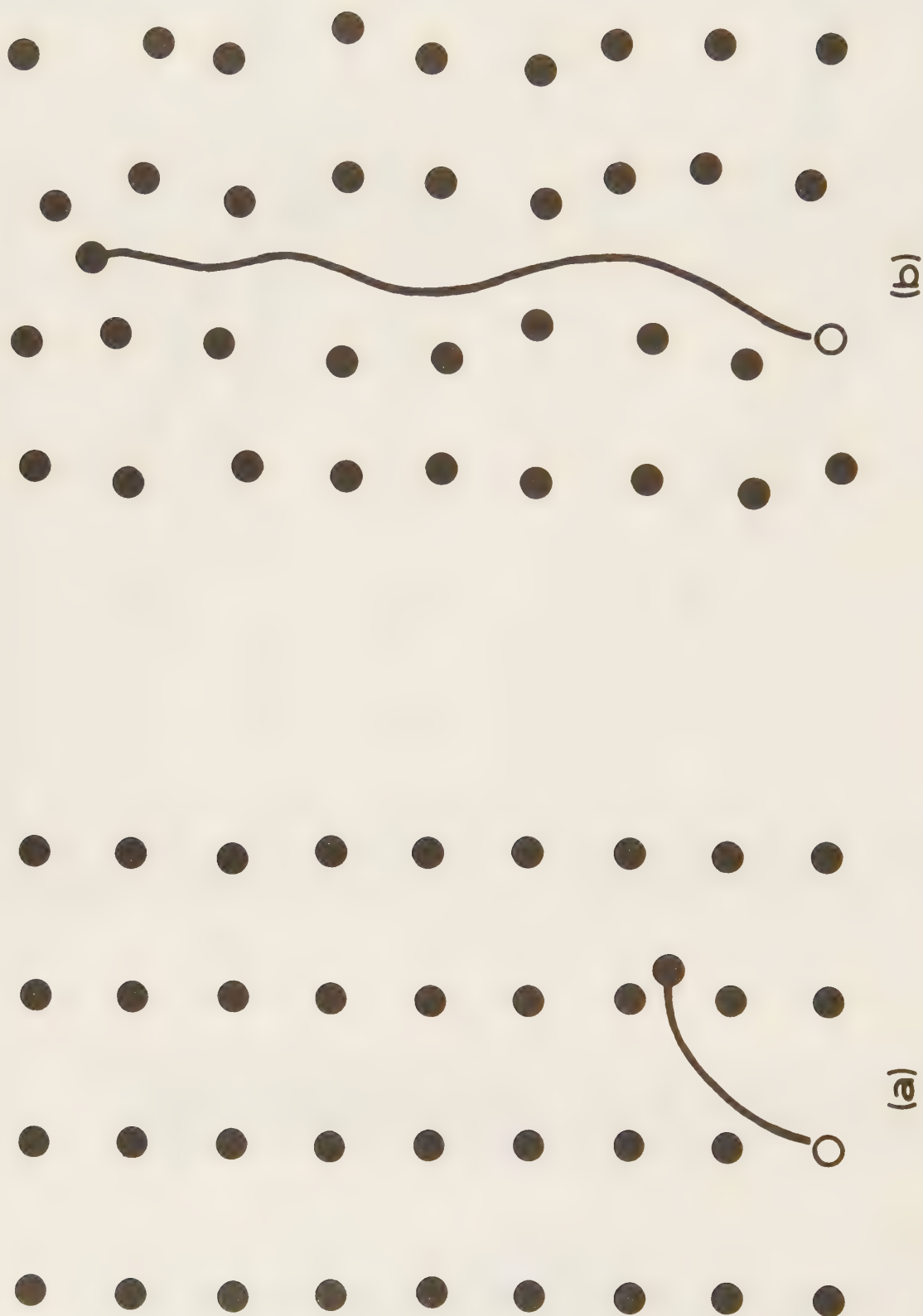


Figure V-19
Différence dans le parcours d'un atome quittant son site
(a) dans un réseau supposé statique
(b) dans un réseau ayant une vibration

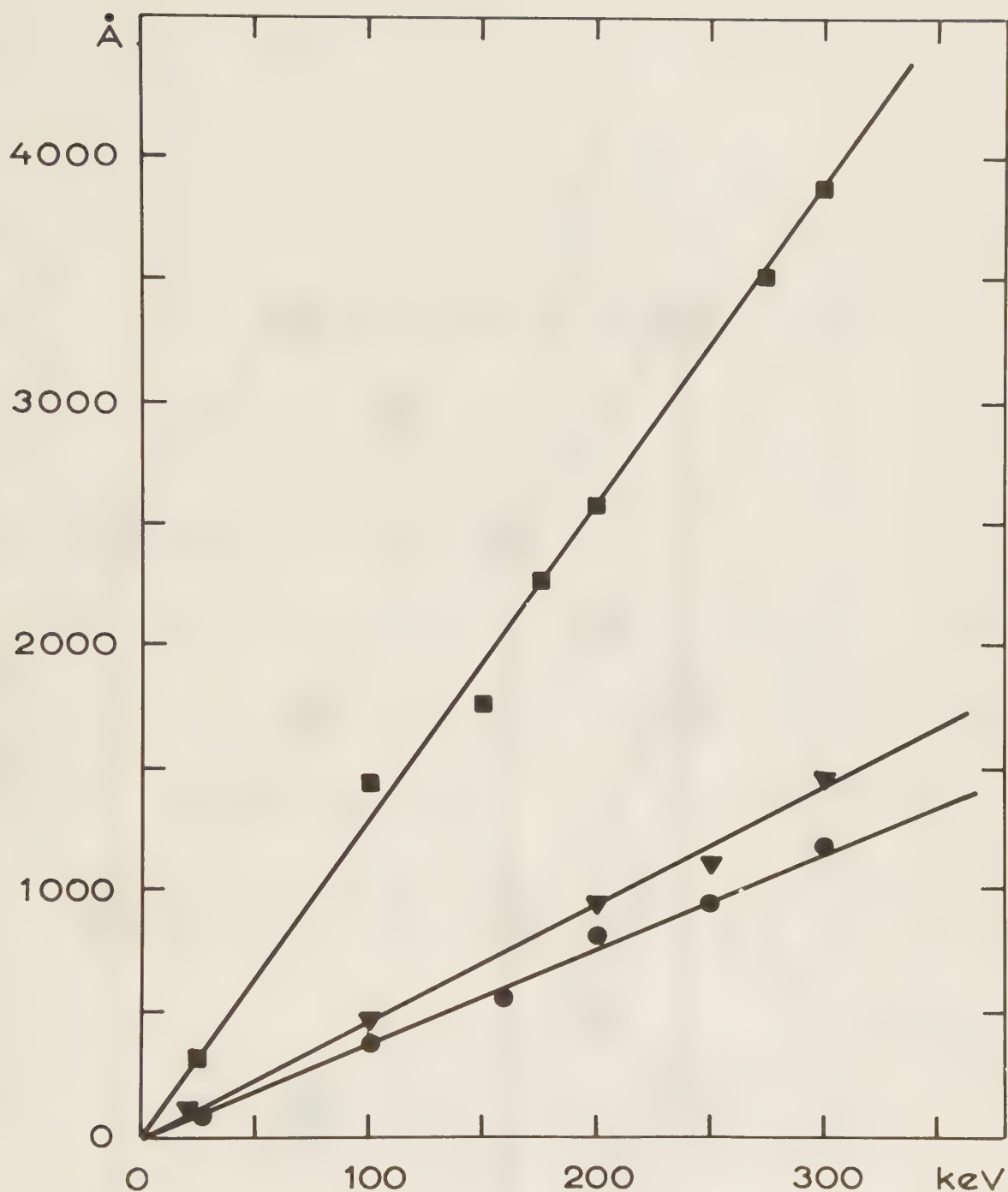


Figure V-20

Moyenne des parcours linéaires des premiers atomes frappés en fonction de l'énergie cinétique reçue
 Le cristal est le cuivre et le projectile est un atome Cu
 Le modèle de potentiel utilisé est le modèle MOL 2 (cf. annexe I) et le modèle de frottements électroniques est celui de FIRSOV [57]

- bombardement du plan [100] (725 K)
- ▼ départ d'un site de réseau à 725 K
- départ d'un site de réseau statique

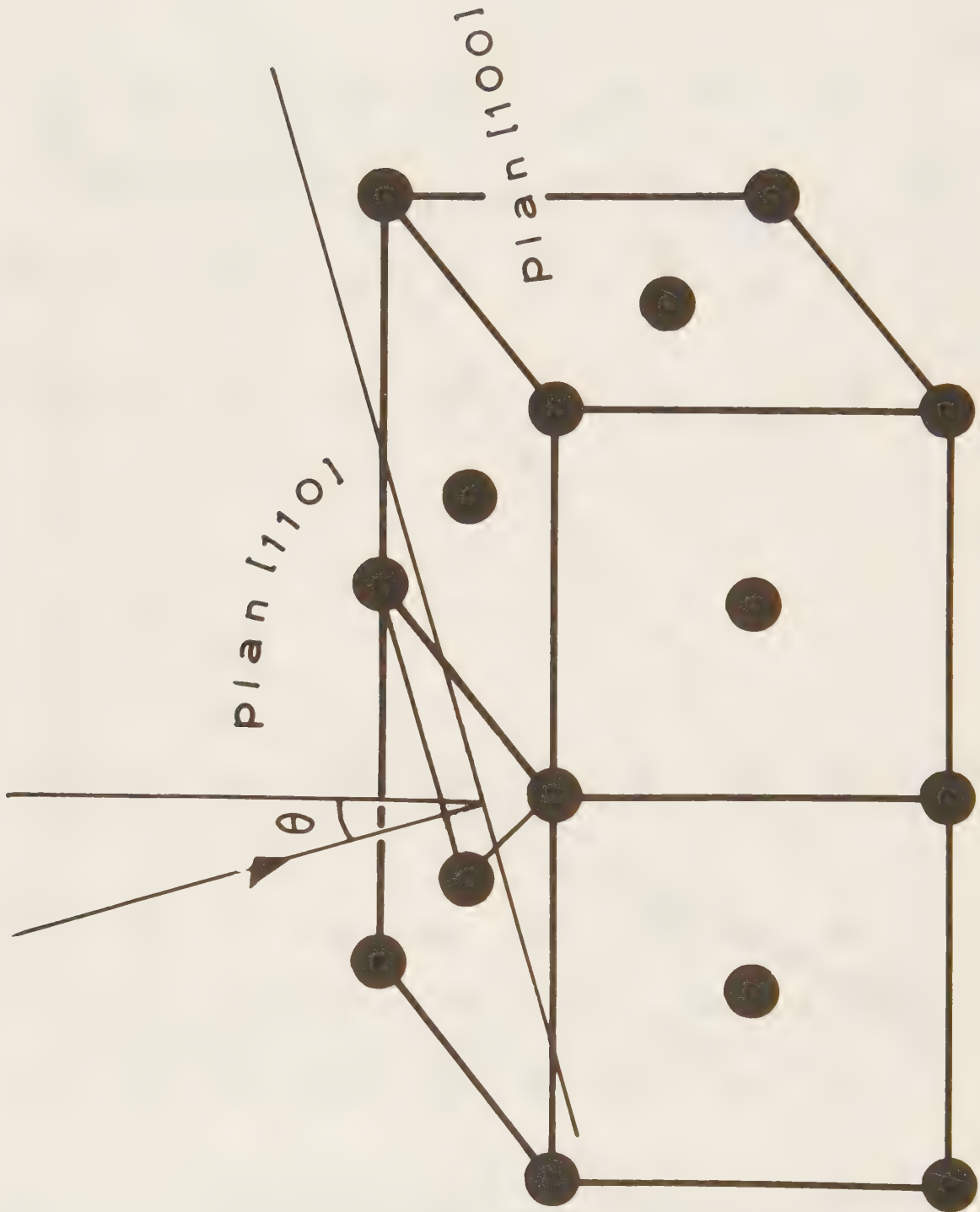


Figure V-21
Orientation du jet atomique pour des simulations
décrites dans le texte (paragraphe 2.2.1)

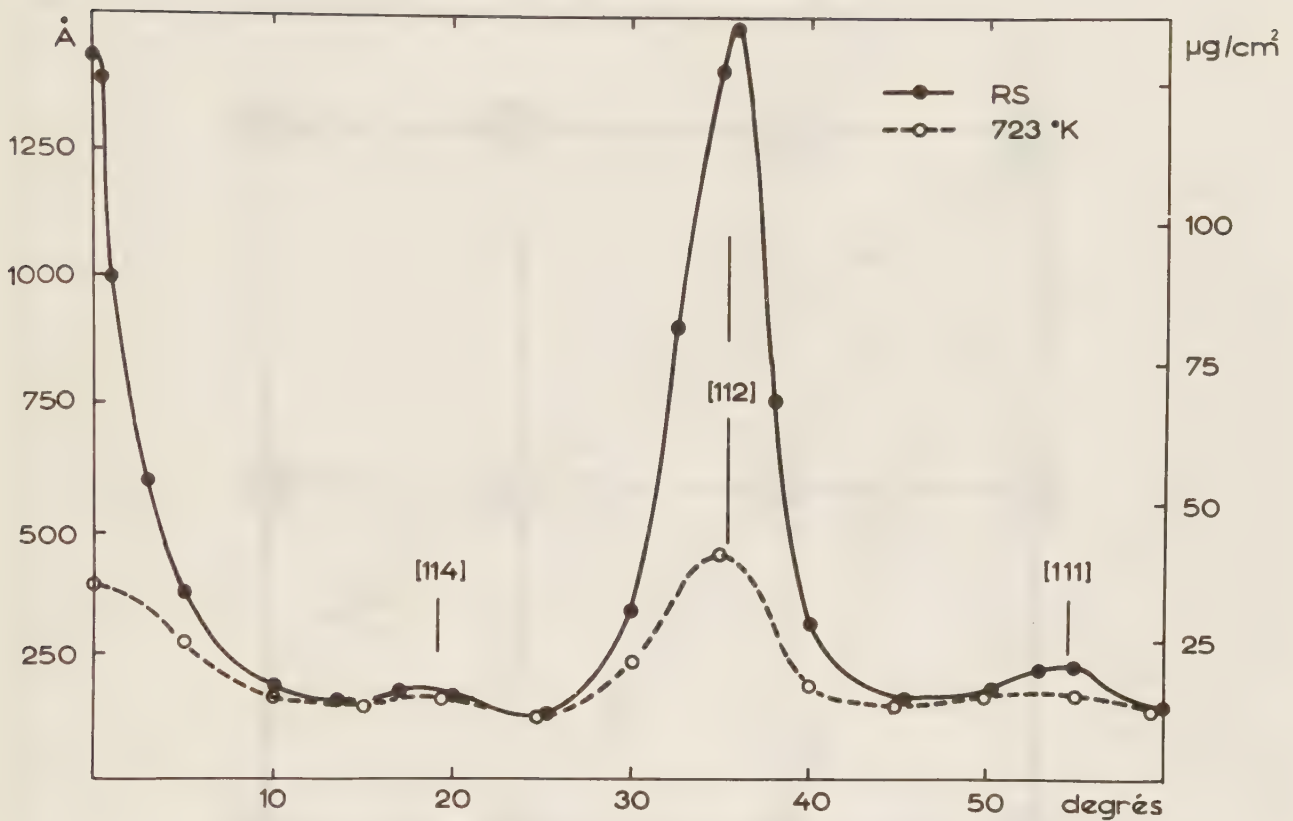


Figure V-22

Moyenne des parcours linéaires des atomes de cuivre dans le cuivre en fonction de leur angle d'incidence par rapport à la normale au plan [100] quand ils sont projetés parallèlement au plan [110].
Le modèle de potentiel utilisé est le modèle MOL 2 (cf. annexe I) et le modèle de frottements électroniques est celui de FIRSOV [57]

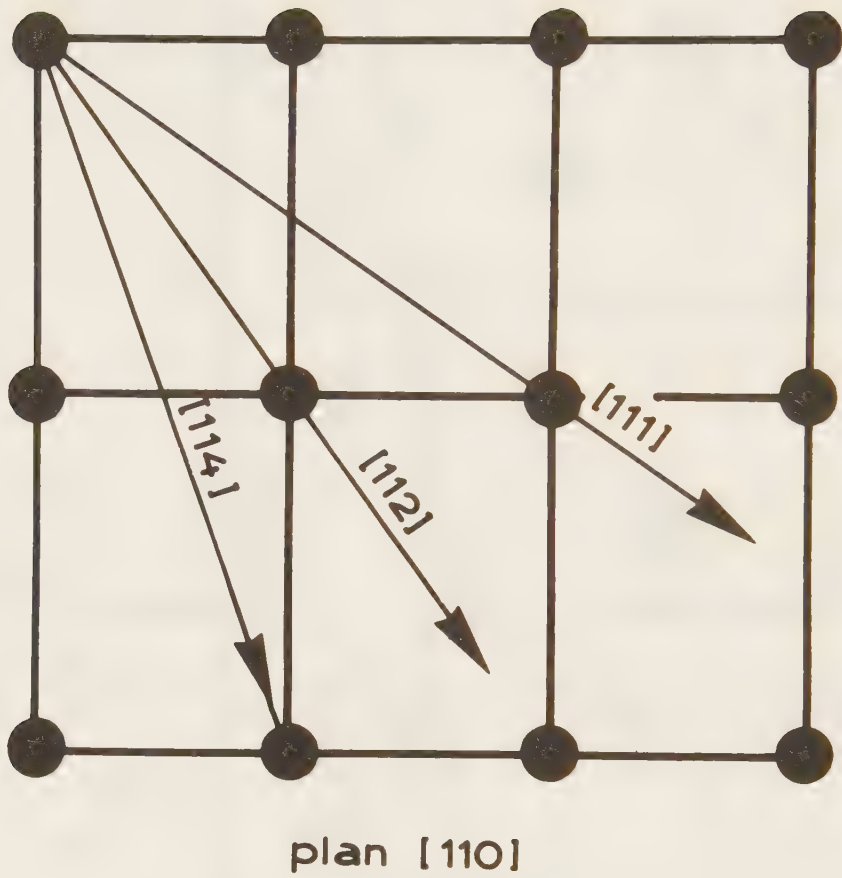


Figure V-23
Directions des principaux canaux parallèles au plan $[110]$

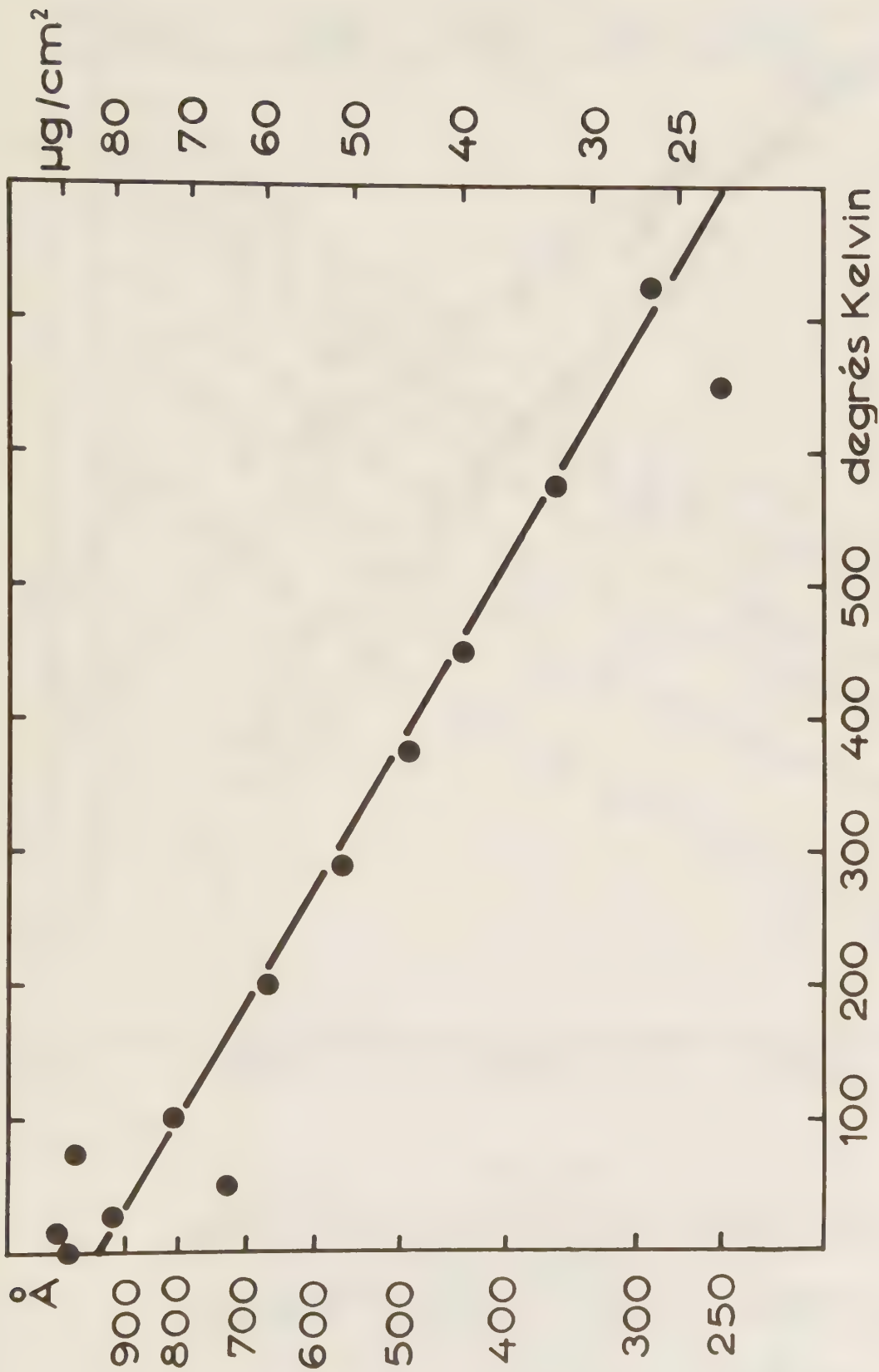


Figure V-24

Moyenne des parcours linéaires des atomes de cuivre dans le canal de direction (100) du cuivre en fonction de la température du cristal

Le premier atome frappé a une énergie cinétique initiale de 25 keV. Le modèle de potentiel utilisé est le modèle MOL 2 (cf. annexe I) et le modèle de frottements électroniques est celui de FIRSOV [57]

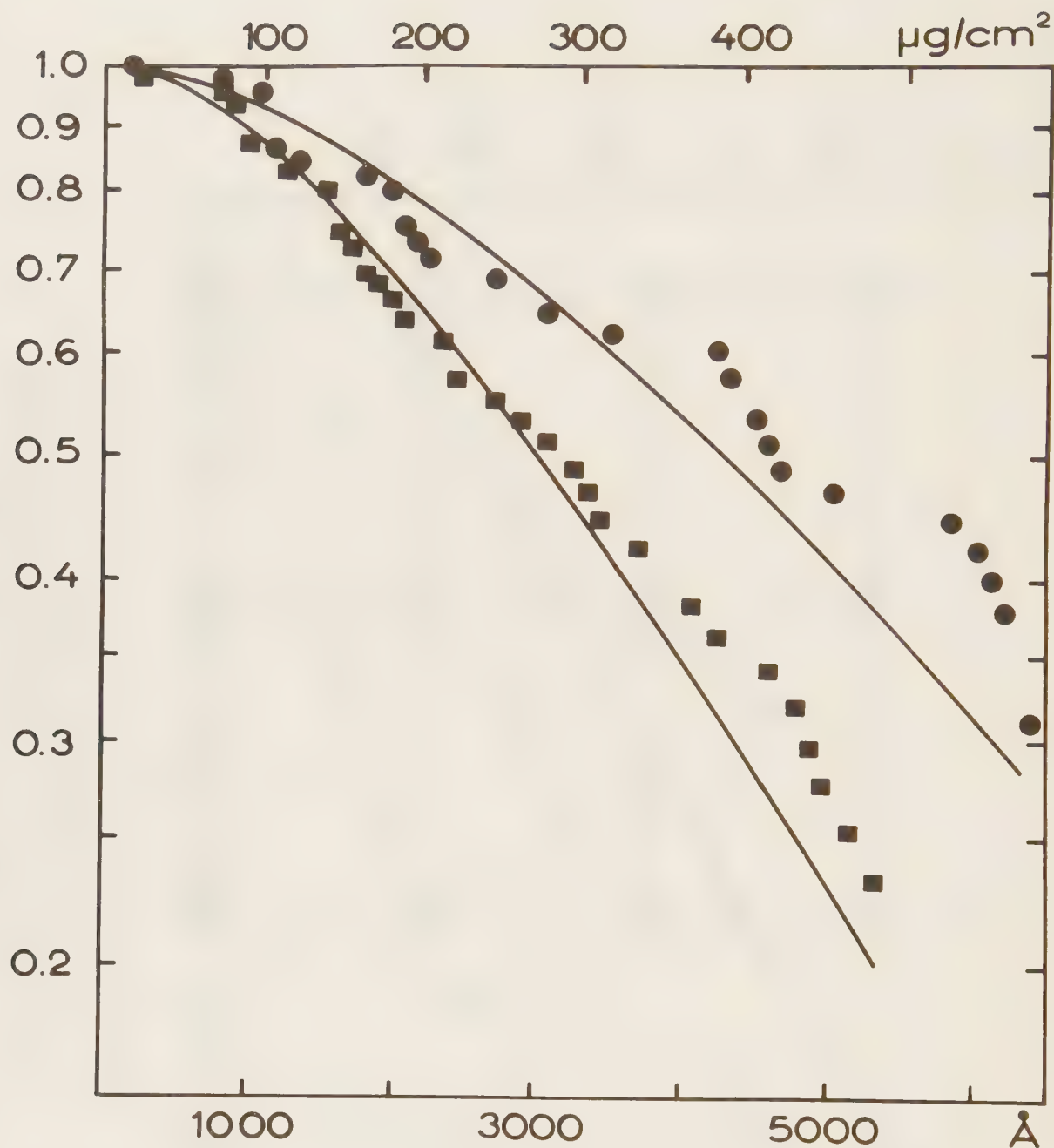


Figure V-25

Distribution statistique des parcours linéaires des atomes Cu envoyés dans un cristal de cuivre parallèlement à la direction (100)

Le cristal est supposé vibrant à 725 K

Le modèle de potentiel utilisé est le modèle MOL 2 (cf. annexe I) et le modèle de frottements électroniques est celui de FIRSOV [57]

● $E_{\text{paf}} = 300 \text{ keV}$

■ $E_{\text{paf}} = 275 \text{ keV}$

— ajustement d'après LEIBFRIED [67]

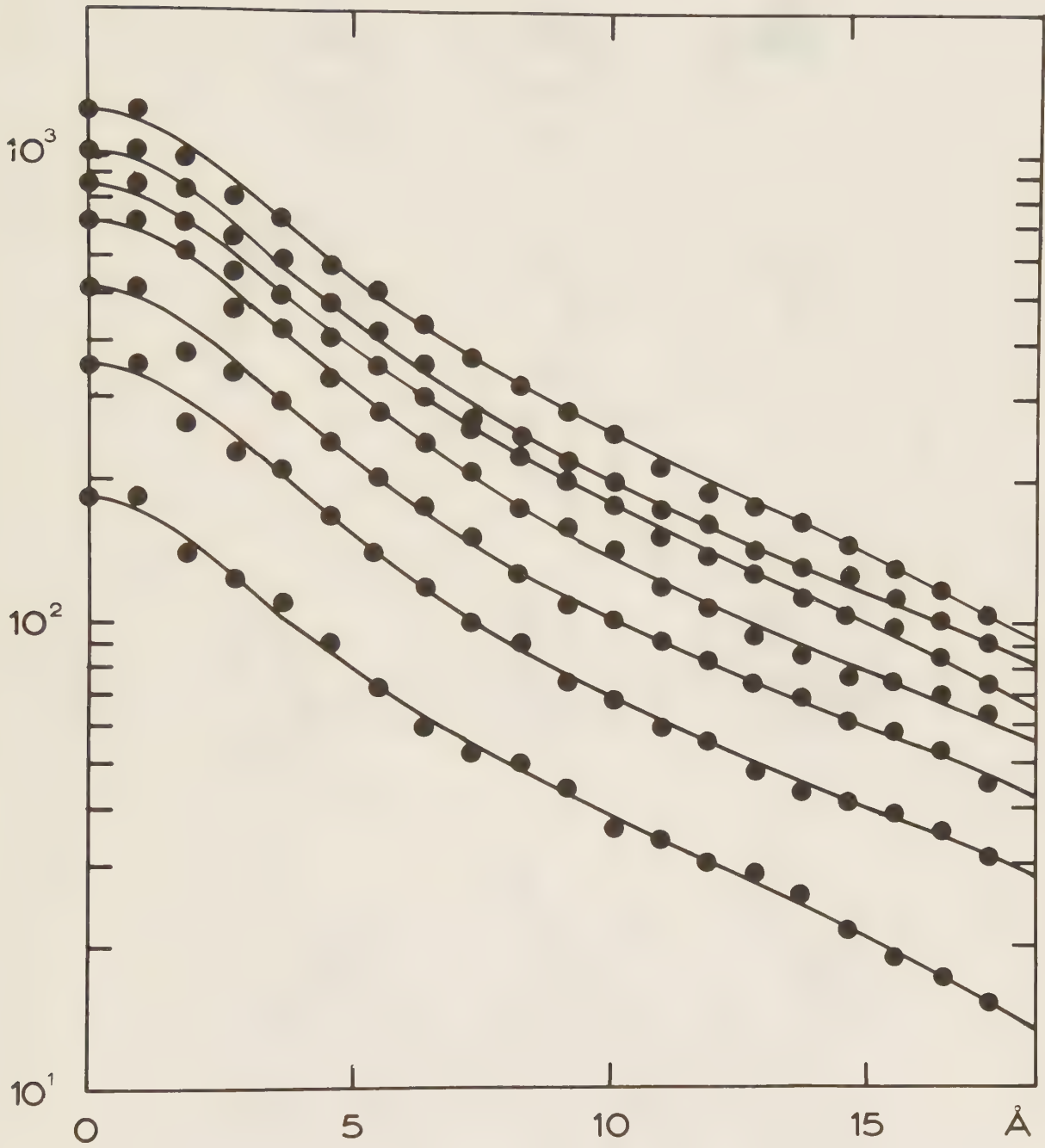


Figure V-26

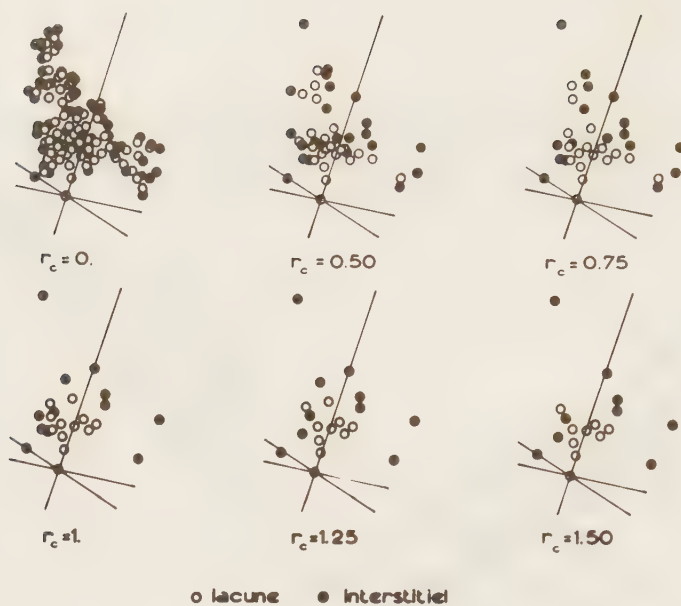
Distribution statistique des distances lacune-interstitiel
des paires de Frenkel créées dans du cuivre supposé en
réseau statique

Les premiers atomes frappés ont des énergies cinétiques
initiales de (de haut en bas) 70, 60, 50, 40, 30, 20 et 10 keV

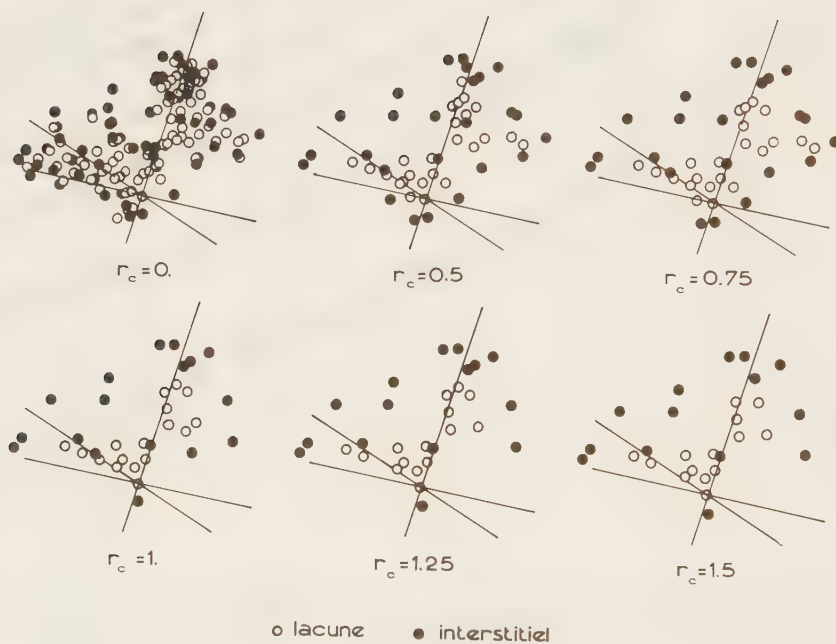
L'énergie seuil de déplacements est égale à 25 eV

Le modèle de potentiel utilisé est le modèle MOL 2
(cf. annexe I) et le modèle de frottements électroniques
est celui de FIRSOV (57)

Les traits continus représentent les ajustements de
l'équation (V.28) citée dans le texte



(a)



(b)

Figure V-27

Répartition spatiale des défauts créés dans le cuivre par une cascade dont le premier atome frappé quitte son site de réseau avec une impulsion initiale correspondant à 400 eV orientée par rapport au réseau dans une direction choisie au hasard

L'énergie seuil de déplacements est égale à 5 eV

Le modèle de potentiel utilisé est le modèle MOL 2 (cf. annexe I) et le modèle de frottements électroniques est celui de FIRSOV [57]

On a représenté successivement les paires de Frenkel dont la distance lacune-interstitiel est supérieure à r_c (exprimée en unité de réseau)

(a) Le réseau est supposé statique

(b) Le réseau est supposé vibrant à 15 K

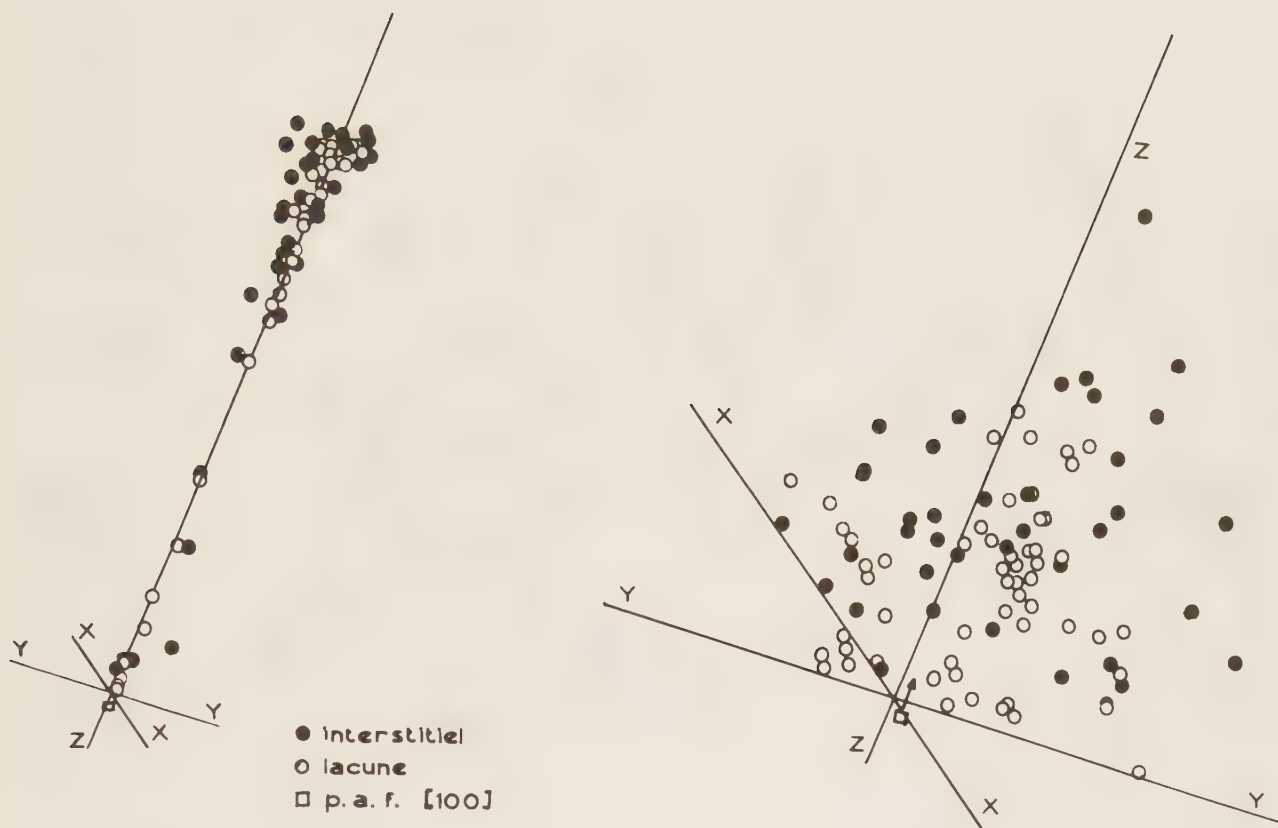


Figure V-28

Répartition spatiale des défauts créés dans le tungstène par une cascade dont le premier atome frappé a reçu une impulsion initiale correspondant à 20 keV orientée parallèlement à la direction $\langle 001 \rangle$

L'énergie seuil de déplacements est égale à 25 eV

Le modèle de potentiel utilisé est le modèle MOL 1 (cf. annexe I) et le modèle de frottements électroniques est celui de FIRSOV [57]. Le réseau est supposé vibrant à 15 K

On n'a représenté que les paires de Frenkel dont la distance lacune-interstitiel est supérieure à une fois et demi l'unité de réseau

A gauche, le premier atome frappé se trouve initialement sur l'axe du canal

A droite, le premier atome frappé se trouve initialement dans une position choisie au hasard

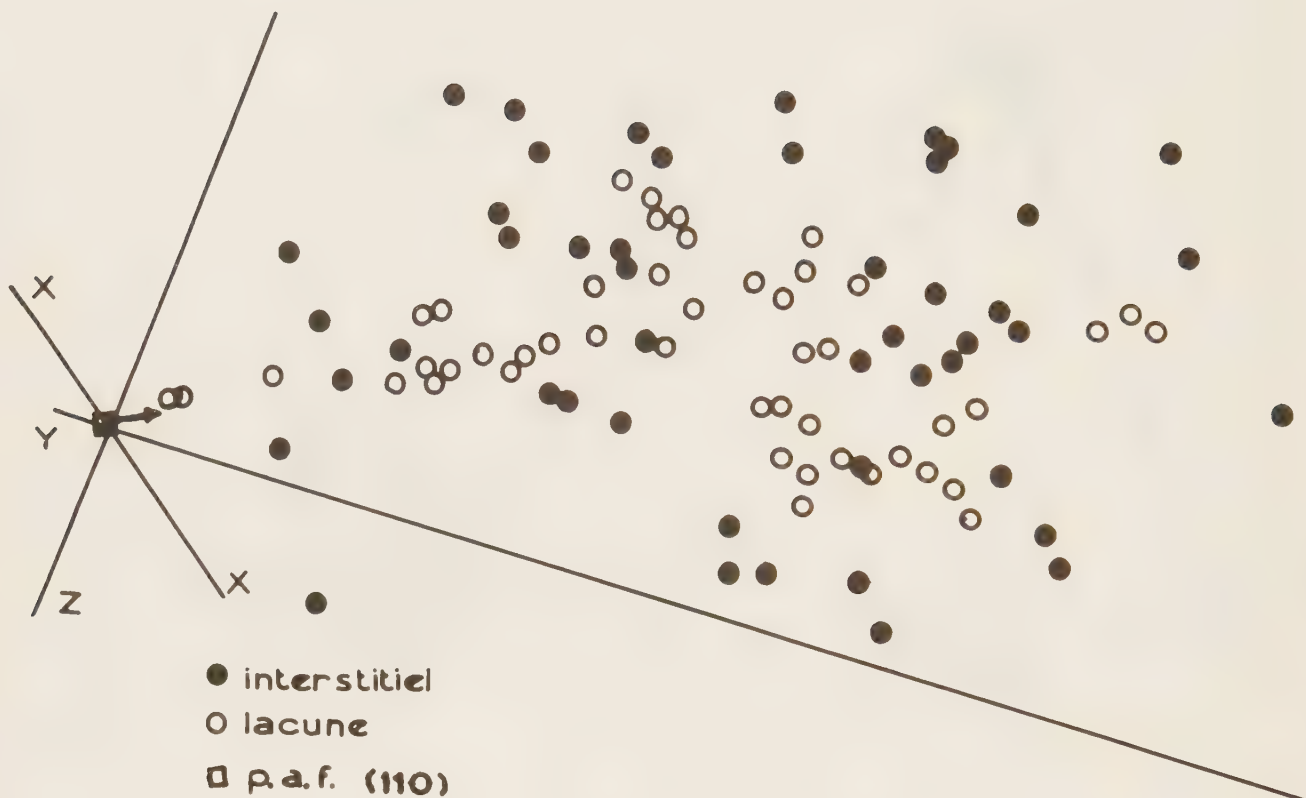


Figure V-29

Répartition spatiale des défauts créés dans le cuivre par une cascade dont le premier atome frappé quitte son site de réseau avec une impulsion initiale correspondant à 20 keV orientée parallèlement à la direction $\langle 001 \rangle$
L'énergie seuil de déplacements est égale à 25 eV
Le modèle de potentiel utilisé est le modèle MOL 2 (cf. annexe I) et le modèle de frottements électroniques est celui de FIRSOV [57]. Le réseau est supposé vibrant à 15 K
On n'a représenté que les paires de Frenkel dont la distance lacune-interstitiel est supérieure à une fois et demi l'unité de réseau

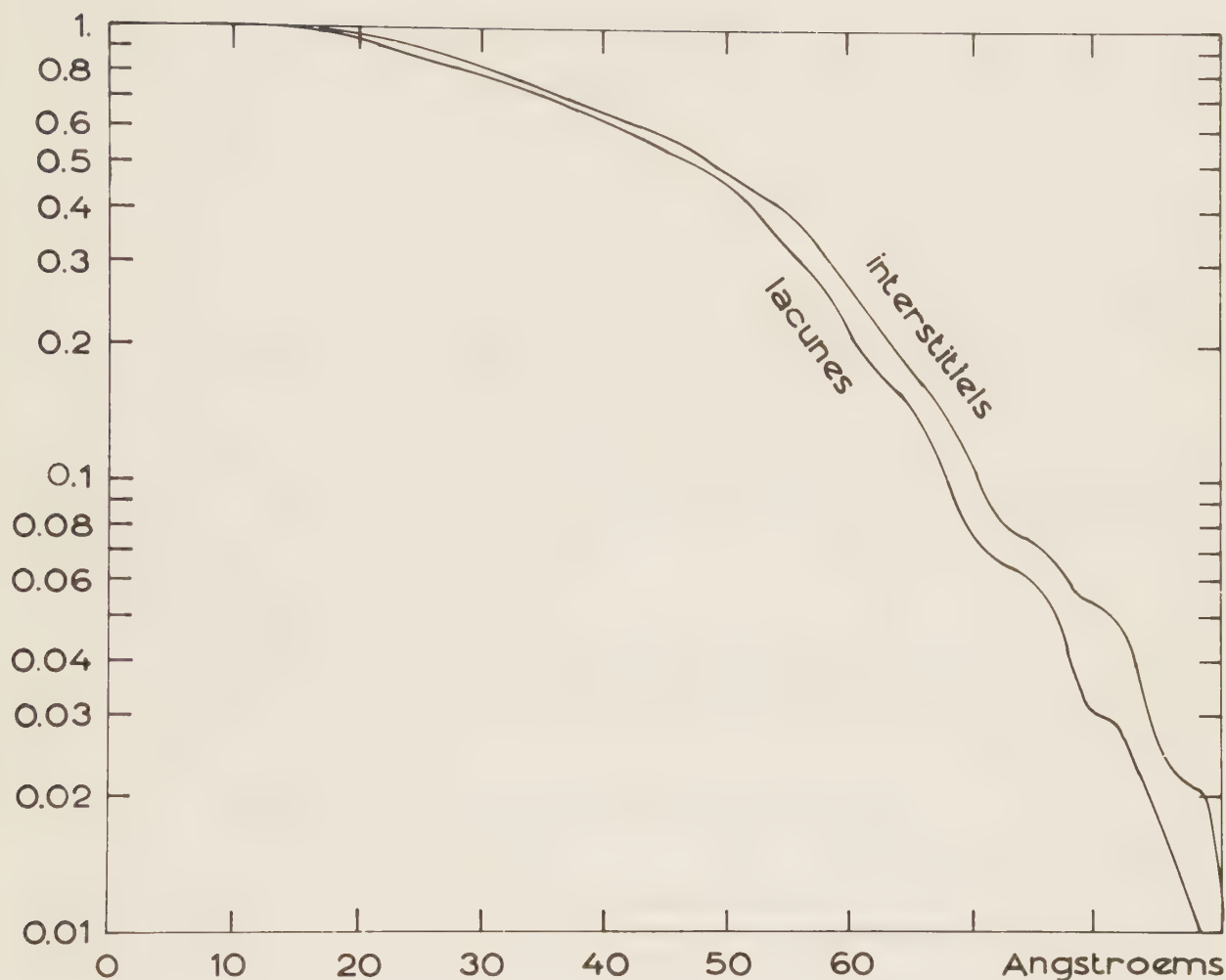


Figure V-30

Distribution statistique des distances des lacunes et des interstitiels au barycentre de la zone endommagée
Le premier atome frappé est un atome du réseau qui a reçu une impulsion initiale correspondant à 20 keV orientée par rapport au réseau dans une direction choisie au hasard
Le solide irradié est un monocristal de cuivre supposé en réseau statique
L'énergie seuil de déplacements est égale à 5 eV
Le modèle de potentiel utilisé est le modèle MOL 2 (cf. annexe I) et le modèle de frottements électroniques est celui de FIRSOV [57]

Chapitre VI

CONCLUSIONS

Notre conclusion sera double : elle concerne les résultats que nous avons obtenus (paragraphe I) et la méthodologie employée (paragraphe II).

I - CONCLUSION SUR LES RESULTATS OBTENUS.

Les résultats que nous avons obtenus se rapportent à l'aspect qualitatif de l'influence du réseau cristallin (paragraphe 1.1) et l'aspect théorique des effets d'irradiation (paragraphe 1.2).

1.1 - Influence du réseau cristallin.

Nous avons obtenu des résultats sur des cas particuliers comme la focalisation et la canalisation (paragraphe 1.1.1) et globalement sur des cascades dont le premier atome frappé quitte son site dans une direction choisie aléatoirement (paragraphe 1.1.2).

1.1.1 - Influence de la focalisation et de la canalisation.

Nos simulations de cascades dont le premier atome frappé a une impulsion initiale telle qu'il peut y avoir focalisation ou canalisation tant avec le modèle d'interactions multiples, qu'avec le modèle de collisions binaires, nous montrent que les résultats peuvent être influencés par la structure cristalline du solide puisque nous avons trouvé qu'il y a effectivement focalisation et canalisation. Nous avons même trouvé qu'aux faibles énergies la canalisation peut disparaître dans les directions cristallines qui ne présentent pas une symétrie par rapport à l'axe du canal, ce qui confirme l'influence du réseau cristallin.

Comme la focalisation peut provoquer des séquences de remplacements atomiques, ce que confirment les résultats de nos simulations, nous pourrions penser que la focalisation permet d'augmenter la distance lacune-interstitiel et avoir ainsi une grosse importance dans le recuit ultérieur des dommages d'irradiation. Les autres résultats de nos simulations ne nous permettent pas de confirmer ce raisonnement. En effet, dans un cristal réel, les atomes sont en vibration et l'influence de l'alignement périodique des atomes diminue ou peut même disparaître. De même, dans la réalité, un premier atome frappé a peu de chance de partir rigoureusement dans une direction de focalisation. Or, dès que nous nous écartons de la direction de focalisation, les transmissions d'énergie sur la rangée de focalisation diminuent rapidement. Par conséquent, à part les cas idéaux où il n'y a pas de vibrations thermiques et où le premier atome frappé quitte son site rigoureusement dans une

direction de focalisation, nous pensons que le réseau cristallin ne peut ni favoriser l'évacuation rapide de l'énergie du premier atome frappé, ni augmenter la distance lacune-interstitiel. Néanmoins, il nous paraît nécessaire de faire un plus grand nombre de simulations avant d'avoir une certitude quelconque sur ce résultat.

La canalisation, au contraire, est un phénomène plus stable et qui subsiste à grande énergie. Elle permet d'augmenter la distance parcourue par l'atome incident. Cependant, nous avons constaté que le pouvoir d'arrêt d'un canal est une constante de l'énergie et qu'il augmente exponentiellement avec la température conformément à la théorie de LEHMANN et LEIBFRIED [92] et que les lois de distribution statistique des parcours d'atomes dans un canal ont la même forme mathématique que celles des parcours d'atomes dans un solide amorphe. Nous concluons que la canalisation ne fait qu'augmenter la moyenne des parcours d'atomes mais ne change en rien la nature physique des dommages d'irradiation.

1.1.2 - Influence de l'ensemble du réseau cristallin.

Nos simulations avec le modèle de collisions binaires nous montrent que les résultats sont distribués statistiquement, aux paramètres près, suivant des lois qui sont obtenues en supposant un solide amorphe. Ainsi, nous avons trouvé que :

(a) le pouvoir d'arrêt du solide est une constante de l'énergie et qu'il diminue légèrement quand la température augmente,

(b) les parcours atomiques sont distribués selon la loi trouvée par LEIBFRIED [67],

$$p(\ell) = \left(\frac{\ell}{\Lambda} + 1\right) \exp\left(-\frac{\ell}{\Lambda}\right) \quad (\text{VI.1})$$

ℓ = parcours linéaire

Λ = longueur à ajuster

(c) les distances lacunes-interstitiels sont distribuées selon une loi que nous avons établi pour des solides amorphes :

$$p(\ell) = \pi_a \left(\frac{\ell}{\Lambda_a} + 1\right)^2 \exp\left(-\frac{2\ell}{\Lambda_a}\right) + \pi_b \left(\frac{\ell}{\Lambda_b} + 1\right)^2 \exp\left(-\frac{2\ell}{\Lambda_b}\right) + (1 - \pi_a - \pi_b) \left(\frac{\ell}{\Lambda_a} + 1\right) \left(\frac{\ell}{\Lambda_b} + 1\right) \exp\left(-\frac{\ell}{\Lambda_a} - \frac{\ell}{\Lambda_b}\right) \quad (\text{VI.2})$$

ℓ = distance lacune-interstitiel

π_a et π_b = proportions à ajuster

Λ_a et Λ_b = longueurs à ajuster

(d) la répartition spatiale des défauts créés se fait conformément à la théorie de BRINKMAN [78], c'est-à-dire un noyau de lacunes entouré d'une couche d'interstitiels

(e) par analyse factorielle, il n'y a pas de différences notables entre populations de cascades dans des réseaux vibrant à des températures différentes.

Nous avons tenté, par une méthode de classification automatique, de regrouper les cascades en deux sous-populations : celles qui sont proches d'une cascade de focalisation et les autres. Nous n'avons pas trouvé de résultats significatifs sur ce point. Nous pensons que cela est dû au fait que la focalisation n'a pas d'influences notables sur les effets d'irradiation hors des cas idéaux que nous

avons décrits au paragraphe 1.1.1 (Nous tenons à remercier notre camarade de l'Ecole des Mines, B. DUQUENNOY, pour son aide dans cette tentative). Tout se passerait donc comme si le solide était amorphe. Par conséquent, nous pouvons conclure que les méthodes de calculs des effets d'irradiation dans un solide amorphe restent valables à condition de recalculer tous les paramètres sur les parcours atomiques de façon à tenir compte des influences de la nature cristalline du solide telle que la présence de la canalisation et du blocage dans les rangées de grande densité atomique.

1.2 - Aspects théoriques des effets d'irradiation.

Par analyse factorielle, nous avons montré que les résultats des simulations dépendent d'une façon importante du modèle de potentiel interatomique et du modèle de frottements électroniques. Quant à l'énergie seuil de déplacements, nous n'avons à définir exactement sa valeur que si celle-ci est inférieure à une dizaine d'électron-volts. Nous pensons donc que la connaissance des modèles théoriques que nous avons à introduire dans nos modèles de simulations numériques est capitale pour le développement ultérieur de nos recherches dans ce domaine.

Cependant, des modèles relativement réalistes que nous avons utilisés nous ont permis de tirer quelques conclusions qualitatives sur l'influence du réseau cristallin et sur divers points théoriques suivants :

(a) Quand il y a vibrations thermiques, les valeurs du facteur de focalisation en fonction de l'énergie sont trop dispersées pour que la notion même de facteur de focalisation ait un sens. Cependant, nos simulations montrent que la propagation rectiligne des collisions dans une direction de grande densité atomique subsiste. Par conséquent, le facteur de focalisation ne nous semble pas être un bon critère qui explique l'existence de la focalisation

(b) Nous pensons que l'énergie seuil de déplacements est une notion commode qui facilite les calculs du modèle de collisions binaires. Nous pourrions la remplacer par l'énergie moyenne de création d'une paire de Frenkel restantes après recombinaison immédiate. Seulement, la distribution statistique des distances lacune-interstitiel suit la loi écrite sous la forme de l'équation (VI.2). Pour connaître cette énergie moyenne, il nous faudrait connaître le nombre de paires de Frenkel restantes après recombinaison immédiate, donc le rayon de recombinaison immédiate. Des études devraient être menées pour connaître la valeur de ce rayon de recombinaison immédiate.

(c) Nous avons trouvé un décrochement d'énergie de la rangée de focalisation que nous n'avons pas pu expliquer autrement que par l'existence d'une énergie de liaison de l'atome à son site. Si cette énergie de liaison existe réellement il faudrait que, dans l'avenir, nos modèles de collisions binaires en tiennent compte.

(d) Etant donnée la précision de l'ajustement des résultats de nos simulations avec la loi écrite sous la forme de l'équation (VI.2), nous pouvons proposer le modèle suivant de création des défauts par irradiation : environ deux tiers des paires de Frenkel sont créées par le départ d'un atome de son site pour aller se placer en position interstitielle et un tiers des paires de Frenkel sont créées par remplacements atomiques.

II - CONCLUSION SUR LA METHODOLOGIE EMPLOYEE.

La méthodologie que nous avons utilisée est basée sur les deux méthodes de simulation numérique (paragraphe 2.1) et d'analyse factorielle (paragraphe 2.2). Ces deux méthodes sont plus fréquemment employées en Sciences Humaines qu'en Sciences Physiques, c'est pourquoi nous allons montrer quels sont les résultats qui ne peuvent être obtenus que par ces deux méthodes et quelles sont les adaptations qui sont nécessaires à leur utilisation.

2.1 - Conclusion sur la simulation numérique.

La simulation numérique est une combinaison de modèles théoriques. Les résultats obtenus par cette méthode dépendent des modèles que nous y avons introduits, notamment les modèles de potentiel interatomique, de frottements électroniques, de collisions et de configuration cristalline. Cependant nous pouvons obtenir des résultats qualitatifs qui nous semblent indépendants des modèles utilisés (paragraphe 2.1.1) et qui sont bien sûr à améliorer (paragraphe 2.1.2).

2.1.1 - Apport de la simulation numérique.

Par simulation numérique nous avons obtenu des résultats qui sont déjà prévus par la théorie :

(a) l'existence de la canalisation, de la focalisation et des séquences de remplacements dans les directions de grande densité atomique,

(b) la croissance du pouvoir d'arrêt d'un canal exponentiellement avec la température du solide,

(c) la configuration de la zone endommagée composée d'un noyau riche en lacunes entouré d'une enveloppe riche en interstitiels.

A cet égard la simulation n'apporte rien d'autre qu'une confirmation de la théorie. Cependant, cette méthode nous conduit à des résultats auxquels nous ne nous attendions pas. Certains de ces résultats ont des explications théoriques a posteriori, mais nous pensons qu'ils peuvent difficilement être prévus par une expérience ou par une méthode de calcul analytique :

(a) le fait que la succession rectiligne des collisions sur une rangée de grande densité atomique existe alors que la notion de facteur de focalisation a perdu de sa signification quand le cristal vibre,

(b) l'influence de la vibration thermique dans la configuration finale de la zone endommagée tant aux faibles énergies qu'aux grandes énergies,

(c) la diminution du pouvoir d'arrêt du solide cristallin pour un atome du solide par la possibilité de pénétrer dans un canal quand les atomes vibrent thermiquement,

(d) le fait que les lois de distribution statistique des effets d'irradiation dans un solide amorphe et dans un solide cristallin ont les mêmes formes aux valeurs des paramètres près.

2.1.2 - Adaptations de la simulation numérique.

Au point de vue méthodologique nous pensons que, puisque les résultats numériques dépendent des hypothèses introduites, nous ne pouvons nous contenter que des résultats qualitatifs. Donc à part un travail d'amélioration des hypothèses, pour les rendre les plus réalistes possibles, nous avons démontré par les résultats que nous avons obtenus,

(a) la souplesse de la méthode de création du cristal au fur et à mesure du développement de la cascade,

(b) l'efficacité de la méthode d'itération de RUNGE-KUTTA dans la résolution des calculs d'interactions à plusieurs corps,

(c) la validité du modèle de collisions simultanées utilisé dans le modèle MARLOWE,

(d) l'importance de la prise en compte des frottements électroniques dans un modèle pour grandes énergies comme le modèle MARLOWE et l'importance moindre dans un modèle pour faibles énergies comme le modèle ANGIANG.

Nous pensons que, dans les simulations numériques ultérieures, il nous faudra tenir compte d'une énergie de liaison de l'atome à son site. Cette énergie est très faible, de l'ordre de trois électron-volts, mais nous ne connaissons pas encore son influence.

2.2 - Conclusion sur l'analyse factorielle.

Si les résultats des simulations numériques dépendent des hypothèses, ceux de l'analyse factorielle dépendent des paramètres qui sont pris en compte. Nous ne voulons pas discuter de la pertinence de tel ou tel paramètre, mais nous tenons à souligner cette dépendance. A cause de cette dépendance, nous pensons qu'il est prudent, comme pour la simulation numérique, de nous en tenir aux résultats qualitatifs.

L'analyse factorielle nous conduit à des résultats qui sont facilement prévus par la théorie ou par l'intuition comme

(a) la grande influence des modèles de potentiel interatomique et de frottements électroniques,

(b) le rapprochement des cascades de focalisation vers l'ensemble des cascades créées au hasard quand il y a vibrations thermiques.

Ces résultats, évidents intuitivement, démontrent l'efficacité de la méthode utilisée et laissent espérer la validité des résultats qui sont moins évidents. Ainsi nous avons pu trancher sur certains points encore contestés par les théoriciens :

(a) On sait que, dans l'ensemble des paramètres étudiés dans l'effet d'irradiation, il existe une certaine redondance, mais on ne sait pas comment regrouper ces paramètres. L'analyse factorielle nous a permis de les regrouper en trois groupes.

(b) On ne sait pas si une cascade dépend de l'amplitude de vibration des atomes du solide ou seulement de l'existence et de la non existence des vibrations thermiques. L'analyse factorielle nous suggère de choisir la deuxième hypothèse.

Mais nous avons fait aussi des découvertes que nous pourrions difficilement faire par d'autres méthodes :

(a) Les résultats des cascades dépendent très peu de la valeur de l'énergie seuil de déplacements quand celle-ci dépasse une dizaine d'électron-volts.

(b) Dans un cristal réel, il n'existe pas de ségrégation nette entre les cascades qui sont proches des cascades de focalisation et ceux qui ne le sont pas.

Par les résultats que nous avons obtenus, nous pensons que les deux méthodes de simulation numérique et d'analyse factorielle sont des instruments puissants qui permettent de résoudre des problèmes complexes tels que l'étude de l'effet d'irradiation dans les solides cristallins. Comme les résultats obtenus dépendent beaucoup des hypothèses que nous avons émises (modèles théoriques pour la simulation

numérique, choix des paramètres pris en compte pour l'analyse factorielle), nous pensons qu'il est prudent de nous en tenir aux résultats qualitatifs. Cette prudence est d'autant moins contraignante que nous pouvons, en Sciences Physiques, obtenir facilement des résultats quantitatifs par d'autres moyens.

Annexe I

LES MODELES DE POTENTIEL INTERATOMIQUE

Nous pensons qu'il n'est plus nécessaire de discuter sur les modèles de potentiel interatomique depuis que TORRENS [50] a publié son livre. Nous nous contentons seulement d'indiquer les modèles dont nous nous sommes servi au cours de notre travail soit pour des simulations, soit pour de simples calculs de vérification ou de comparaison des ordres de grandeur.

Nous notons :

r = la distance interatomique,

$U(r)$ = l'énergie potentielle quand les deux atomes sont distants de r ,

Z_1 = la charge de l'atome incident,

Z_2 = la charge de l'atome cible,

$e = 1.60219 \times 10^{-19}$ Coulomb, la charge élémentaire,

$\epsilon_0 = 10^7/4 \pi \text{ C}^2$, la permittivité du vide,

$C = 2.997925 \times 10^8$ m/s, la vitesse de la lumière,

$a_H = 5.29177 \times 10^{-11}$ m, rayon de BOHR.

Les équations qui suivent sont, sauf indications contraires, écrites dans le système international S.I.

A.1.1 - Modèle de BOHR [52]

BOHR [52] propose un modèle de potentiel de COULOMB écranté de la forme

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e}{4\pi \epsilon_0 r} \exp(-r/a_B) \quad (\text{A.1})$$

avec

$$a_B = 0.8853 a_H / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2} \quad (\text{A.2})$$

A.1.2 - Modèle de BORN - MAYER [119]

$$U(r) = A \exp(-Br) \quad (\text{A.3})$$

A et B sont des constantes ajustables sur les données expérimentales.

En écrivant l'équation (A.3) sous la forme

$$U(r) = A \exp(-r/a) \quad (\text{A.4})$$

ABRAHAMSON [120] a ajusté les paramètres A et a sur le modèle de THOMAS-FERMI-DIRAC. Les valeurs de A et a pour les métaux que nous avons étudiés sont données au tableau A.1.

GIBSON et col. [28] ont écrit l'équation (A.3) sous la forme

$$U(r) = A \exp \left[- \rho(r - r_0) / r_0 \right] \quad (A.5)$$

$r_0 = 2.551 \text{ \AA}$, la distance des proches voisins du cuivre.

Ils ont ajusté A et ρ sur la constante élastique expérimentale du cuivre. Ils ont proposé trois séries de valeurs de A et ρ que nous reproduisons au tableau A.2. A chacune de ces trois séries correspond un modèle de potentiel que nous notons dans ce texte par GIB1, GIB2 et GIB3 respectivement.

Pour le fer-alpha, ERGINSOY et col. [24-26] ont proposé divers ajustements qui aboutissent au modèle suivant que nous notons par ERG :

$U(r)$ est exprimé en électron-volts et r en demi-unité de réseau ($2.845 \text{ \AA}$)

$$U(r) = \begin{cases} (0.7/r) 8573 \exp(-6.547 r) & r \leq 0.7 \\ 8573 \exp(-6.6547 r) & 0.7 < r \leq 1.35 \\ 0.223 \left\{ \exp[-2\alpha(r - r^1)] - 2 \exp[-\alpha(r - r^1)] \right\} & 1.35 < r \leq 2 \end{cases} \quad (A.6)$$

avec $\alpha = 1.3885 \text{ \AA}^{-1}$ et $r^1 = 2.845 \text{ \AA}$ à convertir en demi-unité de réseau ou inverse de demi-unité de réseau.

A.1.3 - Modèle de MOLIERE [116]

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e}{4 \pi \epsilon_0 r} \left[0.35 y + 0.55 y^4 + 0.1 y^{20} \right] \quad (A.7)$$

$$y = \exp(-0.3 r/a_F) \quad (A.8)$$

a_F = le rayon d'écrantage donné par la formule

$$a_F = 0.8853 a_H / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3} \quad (A.9)$$

Nous notons MOL1 les modèles de potentiel qui utilisent un rayon d'écrantage donné par l'équation (A.9).

ROBINSON et TORRENS [41, 45] ont ajusté le rayon d'écrantage sur la valeur du potentiel donné par le modèle de BORN - MAYER à la distance de proche voisin des atomes dans le réseau. Nous notons les modèles de potentiel qu'ils proposent par MOL2. Les modèles qui ont servi à l'ajustement sont celui de GIBSON et col. [28] pour le cuivre, de ERGINSOY et col. [24-26] pour le fer et de THOMPSON [121] pour l'or.

Les différentes valeurs du rayon d'écrantage sont données au tableau A.3.

Sauf indication contraire, le modèle de potentiel interatomique de MOLIERE utilisé sera toujours le modèle MOL2.

A.1.4 - Modèle de JOHNSON [113]

$$U(r) = A (r - B)^3 + Cr + D$$

U en électron-volts

r en Angstroems

Les valeurs de A, B, C et D sont données au tableau A.4.

Annexe II

LES PARAMETRES CARACTERISANT UNE CASCADE

En sciences économiques, la recherche d'un ou des indicateurs valables provoque des discussions infinies. En sciences physiques, la situation est parfois à peine plus claire et l'étude des effets d'irradiation en est un exemple des plus éloquents à cause de la complexité du phénomène. Nous évitons donc de discuter de l'intérêt de tel ou tel paramètre dont nous avons ou n'avons pas tenu compte. Dans une analyse factorielle, tous les paramètres sont intéressants a priori puisque c'est une analyse qui ne se base sur aucune hypothèse statistique. Tout notre problème sera donc d'étudier le maximum de paramètres. Nous pensons que les vingt-sept paramètres dont nous donnons la liste au tableau A.5 sont les seuls qui aient une quelconque signification statistique pour les populations de cascades que nous avons étudiées au chapitre V. Dans ce qui suit, nous donnons les définitions de ces paramètres.

Paramètre 1 : NOMBRE DE COLLISIONS - C'est le nombre total de toutes les collisions entre les atomes du solide pendant tout le temps de la création de la cascade.

Paramètre 2 : NOMBRE D'ATOMES DEPLACES - C'est le nombre d'atomes ayant reçu une énergie cinétique supérieure à l'énergie seuil de déplacements qui sont déplacés de leur site pour se trouver en position interstitielle ou pour occuper le site d'un autre atome.

Paramètre 3 : NOMBRE DE LACUNES CREEES - C'est le nombre de lacunes créées par les atomes qui ont quitté leur site et dont le site n'est pas occupé par un autre atome.

Paramètre 4 : NOMBRE DE REMPLACEMENTS ATOMIQUES - C'est le nombre d'atomes qui ont quitté leur site pour aller occuper le site d'un autre après une collision qui fait descendre leur énergie en dessous de l'énergie de seuil de déplacements. La différence entre le nombre d'atomes déplacés et le nombre de remplacements atomiques donne le nombre d'interstitiels créés.

Paramètre 5 : NOMBRE DE SEQUENCES DE FOCALISATION - Nous supposons qu'il y a séquence de focalisation quand il y a une succession de plus de dix chocs quasi-frontaux. Nous définirons plus loin les chocs quasi-frontaux.

Paramètre 6 : PERTE D'ENERGIE PAR FROTTEMENTS ELECTRONIQUES - C'est la somme de toutes les pertes d'énergie qui sont calculées avant chaque collision inélastique.

Paramètre 7 : ENERGIE CINETIQUE RESTANTE APRES L'ARRET DES ATOMES ENERGIQUES - Dans le modèle MARLOWE, les atomes sont considérés comme arrêtés quand leur énergie cinétique est inférieure à l'énergie de coupure. Ce paramètre, représente le total des énergies qui sont ainsi éliminées.

Paramètre 8 : PERTE D'ENERGIE PAR TRANSMISSION D'ENERGIES INFERIEURES A L'ENERGIE SEUIL - Quand un atome a reçu une énergie inférieure à l'énergie seuil de déplacements, il ne quitte pas son site mais l'énergie qui lui est communiquée est perdue pour la création des défauts. Ce paramètre donne la somme de toutes ces énergies perdues.

Paramètre 9 : PERTE D'ENERGIE PAR REMPLACEMENTS ATOMIQUES - Quand, après une collision, un atome remplace un autre, l'énergie qui lui reste est perdue pour la création des défauts. Ce paramètre donne la somme de ces pertes d'énergie.

Paramètre 10 : NOMBRE TOTAL DE CHOCS QUASI-FRONTAUX - Nous appelons chocs quasi-frontaux une collision telle qu'il ne reste plus après le choc qu'un dixième d'électron-volts à l'atome incident. Il y a naturellement là un remplacement atomique. Ce paramètre donne le total de ces chocs.

Paramètre 11 : NOMBRE DE CHOCS QUASI-FRONTAUX SIMPLES - Un choc quasi-frontal est dit simple quand l'ancien atome cible ne provoque pas un deuxième choc quasi-frontal avec un troisième atome.

Paramètre 12 : NOMBRE DE DOUBLES CHOCS QUASI-FRONTAUX - Un double choc quasi-frontal est une séquence de deux chocs quasi-frontaux successifs qui ne sont pas suivis d'un troisième choc quasi-frontal. C'est-à-dire que le troisième atome ne provoque pas un choc quasi-frontal avec un quatrième atome.

Paramètres 13 et 14 : NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION $\langle 110 \rangle$ et NOMBRE DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION $\langle 100 \rangle$ - Ce sont les nombres totaux des séquences de plus de deux chocs quasi-frontaux qui sont alignés suivant ces directions ou les directions équivalentes. Il y a des séquences de remplacements dans d'autres directions telles que les directions $\langle 111 \rangle$ et $\langle 112 \rangle$, mais ils ne sont pas assez nombreux pour qu'une étude statistique soit valable. Pour les solides cubiques centrés, la direction $\langle 110 \rangle$ est remplacée par $\langle 111 \rangle$.

Paramètres 15 à 18 : DISTANCE PARCOURUE PAR LE PREMIER ATOME FRAPPE, PENETRATION DU PREMIER ATOME FRAPPE, DEPLACEMENT LATERAL DU PREMIER ATOME FRAPPE et PARCOURS LINEAIRE DU PREMIER ATOME FRAPPE - Nous avons déjà défini ces paramètres au chapitre II.

Paramètres 19 à 27 : NOMBRE DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON XX U. RESEAU - C'est le nombre de lacunes qui restent quand nous avons éliminé les paires de Frenkel dont les distances lacunes - interstitiels sont inférieures à XX unités de réseau. L'unité de réseau du cuivre cubique à faces centrées est égale à $3.6153 \text{ \AA}$.

Tableau A.1

CONSTANTES DU MODELE DE BORN-MAYER CALCULEES PAR ABRAHAMSON [120]

	A (eV)	a ₀ (Å)
Al	4513	0.269
Fe	11860	0.279
Cu	13700	0.281
Mo	23115	0.284
Ag	26916	0.286
W	49742	0.289
Au	52828	0.2893

Tableau A.2

CONSTANTES DU MODELE DE BORN-MAYER CALCULEES PAR GIBSON et col. [28]

Modèle	A (eV)	ρ
GIB1	0.0392	16.97
GIB2	0.0510	13.00
GIB3	0.1004	10.34

Tableau A.3

RAYONS D'ECRANTAGE DU MODELE DE POTENTIEL DE MOLIERE [116]

Modèles Auteurs	MOL 1 FIRSOV [117]	MOL 2 ROBINSON et TORRENS [41, 45]
Fe	0.0996	0.0781
Cu	0.0960	0.0738
Mo	0.0849	
Ag	0.0818	
W	0.0703	
Au	0.0688	0.0752

Tableau A.4

VALEUR DES CONSTANTES DU MODELE DE POTENTIEL DE JOHNSON [102]

Métal	r (Å)	A	B	C	D
Fe	1.90 - 2.40	- 2.195976	3.097910	2.704060	- 7.436448
	2.40 - 3.00	- 0.639230	3.115829	0.477871	- 1.581570
	3.00 - 3.44	- 1.115035	3.066403	0.466892	- 1.547967
V	2.00 - 2.53	- 1.496112	2.731297	- 0.599656	1.614190
	2.53 - 3.17	0.095514	0.304042	- 2.202314	4.625125
	3.17 - 3.63	- 1.430039	3.361421	0.309466	- 1.095655

Tableau A-5

LISTE DES PARAMETRES TENUS EN COMPTE DANS L'ANALYSE FACTORIELLE DES CASCADES

PARAMETRE NUMERO 1
NOMBRE DE COLLISIONS

PARAMETRE NUMERO 2
NOMBRE D' ATOMES DEPLACES

PARAMETRE NUMERO 3
NOMBRE DE LACUNES CREEES

PARAMETRE NUMERO 4
NOMBRE DE REMPLACEMENTS ATOMIQUES

PARAMETRE NUMERO 5
NOMBRE DE SEQUENCES DE FOCALISATION

PARAMETRE NUMERO 6
PER T D' ENERGIE PAR FROTTEMENTS ELECTRONIQUES

PARAMETRE NUMERO 7
ENERGIE CINETIQUE RESTANTE APRES L' ARRET DS ATOMES ENERGIEUX

PARAMETRE NUMERO 8
PERTE D' ENERGIE PAR TRANSMISSIONS D' ENERGIES INFERIEURES A L' ENERGIE SEUIL

PARAMETRE NUMERO 9
PERTE D' ENERGIE PAR REMPLACEMENTS ATOMIQUES

PARAMETRE NUMERO 10
NOMBRE TOTAL DE CHOCS QUASI-FRONTAUX

PARAMETRE NUMERO 11
NOMBRE DE CHOCS QUASI-FRONTAUX SIMPLES

PARAMETRE NUMERO 12
NOMBRE DE DOUBLES CHOCS QUASI-FRONTAUX

PARAMETRE NUMERO 13
NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (110)

PARAMETRE NUMERO 14
NOMBRE DE SEQUENCES DE REMPLACEMENTS DANS LA DIRECTION (100)

PARAMETRE NUMERO 15
DISTANCE PARCOURUE PAR LE PREMIER ATOME FRAPPE

PARAMETRE NUMERO 16
PENETRATION DU PREMIER ATOME FRAPPE

PARAMETRE NUMERO 17
DEPLACEMENT LATERAL DU PREMIER ATOME FRAPPE

PARAMETRE NUMERO 18
PARCOURS LINEAIRE DU PREMIER ATOME FRAPPE

PARAMETRE NUMERO 19
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.25 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 20
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.50 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 21
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 0.75 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 22
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.00 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 23
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.25 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 24
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.50 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 25
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 1.75 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 26
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.00 U. RESEAU

PARAMETRE NUMERO 27
NBR. DE LACUNES RESTANTES APRES RECOMBINAISON IMMEDIATE DE RAYON 2.25 U. RESEAU

REFERENCES

- [1] E.P. WIGNER
J. Appl. Phys. 17 (1946) 857.
- [2] C. CAWTHORNE, E. FULTON
(a) The Nature of Small Defect Clusters, Vol. 2, Edité par J. MAKIN -
AERE (Harwell - 1966) p. 446
(b) Nature, 216 (1967) 515.
- [3] D.S. BILLINGTON, J.M. CRAWFORD
Radiation Damage in Solids - Princeton Univ. Press (Princeton - 1961).
- [4] G. CARTER, J.S. COLLIGON
Ion Bombardment of Solids - Heinemann (London - 1968).
- [5] L.T. CHADDERTON
Radiation Damage in Crystals - Methuen (London - 1964).
- [6] L.T. CHADDERTON, I.M. TORRENS
Fission Damage in Crystals - Methuen (London - 1968).
- [7] J.W. CORBETT, L.C. IANNIELLO
Radiation Induced Voids in Metals - USAEC (Albany - 1972)
- [8] G. DEARNALEY, J.H. FREEMAN, R.S. NELSON, J. STEPHEN
Ion Implantation - North Holland (Amsterdam - 1973)
- [9] M. KAMINSKY
Atomic and Ionic Impact Phenomena on Metal Surfaces - Springer Verlag (Berlin
1965).
- [10] J.W. MAYER, L. ERIKSSON, J.A. DAVIES
Ion Implantation in Semiconductors - Academic Press (New-York - 1970).
- [11] D.V. MORGAN
Channeling - Theory, Observation and Applications - John Wiley (London - 1973).

- [12] R.S. NELSON
The Observation of Atomic Collisions in Crystalline Solids - North-Holland
(Amsterdam - 1968).
- [13] D.W. PALMER, M.W. THOMPSON, P.D. TOWNSEND
Atomic Collision Phenomena in Solids - North-Holland (Amsterdam - 1970).
- [14] R. STRUHMANN, J. NIHOUL, R. GEVERS, S. AMELINCKX
The Interaction of Radiation with Solids - North-Holland (Amsterdam - 1964).
- [15] M.W. THOMPSON
Defects and Radiation Damage in Metals - Cambridge University Press
(Cambridge - 1969).
- [16] ***
Radiation Damage in Solids - IAEA (Vienna - 1962).
- [17] ***
Radiation Damage in Reactor Materials - IAEA (VIENNA - 1969).
- [18] J.U. ANDERSON, L.C. FELDMAN
Phys. Rev., B1 (1970) 2063.
- [19] J.H. BARRETT
(a) Phys. Rev., 166 (1968) 219
(b) Phys. Rev., B3 (1971) 1527.
- [20] J.R. BEELER JR
(a) J. Appl. Phys., 35 (1964) 2226
(b) J. Appl. Phys., 37 (1966) 3000
(c) Phys. Rev., 150 (1966) 470
(d) Radiation Damage in Reactor Materials, Vol. II - IAEA
(Vienna - 1969) p. 3.
- [21] J.R. BEELER JR, D.G. BESCO
(a) Radiation Damage in Solids, Vol. 1 - IAEA (Vienna - 1962) p. 43
(b) Proc. Int. Conf. on Crystal Lattice Defects, 18 Suppl. 3
Conf. J. Phys. Soc. Japan (1963) 159
(c) J. Appl. Phys., 34 (1963) 2873
(d) Bull. Amer. Phys. Soc., 8 (1963) 339
(e) Phys. Rev., 134 (1964) A 530.
- [22] D.J. BIERMAN, D. VAN VLIET
Physica, 57 (1972) 221.
- [23] DANG DINH CUNG
J. de Physique, 34 (1973) C 7.
- [24] C. ERGINSOY, G.H. VINEYARD
Bull. Amer. Soc., II, 8 (1963) 196.

- [25] C. ERGINSOY, G.H. VINEYARD, A. ENGLERT
Phys. Rev., 133 (1964) A 595.
- [26] C. ERGINSOY, G.H. VINEYARD, A. SHIMIZU
Phys. Rev., 139 (1965) A 118.
- [27] W.L. GAY, D.E. HARRISON JR
Phys. Rev., 135 (1964) A 1780.
- [28] J.B. GIBSON, A.N. GOLAND, M. MILGRAM, G.H. VINEYARD
Phys. Rev., 120 (1960) 1229.
- [29] D.E. HARRISON JR, R.W. LEEDS, W.L. GAY
J. Appl. Phys., 36 (1965) 3154.
- [30] D.E. HARRISON JR, N.S. LENY, J.P. JOHNSON III, H.M. EFFRON
J. Appl. Phys., 39 (1968) 3742.
- [31] D.E. HARRISON JR, W.L. MOORE, H.T. HOLCOMBE
Rad. Eff., 17 (1973) 167.
- [32] T. ISHITANI, R. SHIMIZU
Jap. J. Appl. Phys., 10 (1971) 821.
- [33] T. ISHITANI, R. SHIMIZU, K. MURATA
(a) Jap. J. Appl. Phys., 11 (1972) 125
(b) Phys. Stat. Sol. (b), 50 (1972) 681
- [34] D.V. MORGAN, D. VAN VLIET
(a) Can. J. Phys., 46 (1968) 503
(b) Atomic Collision Phenomena in Solids - Edité par D.W. PALMER,
M.W. THOMPSON, P.D. TOWNSEND - North-Holland (Amsterdam - 1970) p.476.
(c) Rad. Eff., 5 (1970) 157
(d) Rad. Eff., 8 (1971) 51
(e) Rad. Eff., 12 (1972) 203.
- [35] M.J. NORGETT, M.T. ROBINSON, I.M. TORRENS
Une méthode de calcul du nombre de déplacements atomiques dans les métaux
irradiés - Rapport CEA - R - 4389 (1972).
- [36] O.S. OEN, D.K. HOLMES, M.T. ROBINSON
J. Appl. Phys., 34 (1963) 302.
- [37] O.S. OEN, M.T. ROBINSON
(a) Appl. Phys. Letters, 2 (1963) 83
(b) J. Appl. Phys., 35 (1964) 2515.
- [38] M.T. ROBINSON, O.S. OEN
(a) Appl. Phys. Letters, 2 (1963) 30
(b) Phys. Rev., 132 (1963) 2385.

- [39] M.T. ROBINSON, O.S. OEN, D.K. HOLMES
Le Bombardement Ionique - Colloque de Bellevue - CNRS (Paris - 1962) p. 105.
- [40] M.T. ROBINSON, K. ROSSLER, I.M. TORRENS
J. Chem. Phys., 60 (1974) 680.
- [41] M.T. ROBINSON, I.M. TORRENS
Phys. Rev., B 9 (1974) 5008.
- [42] A. SHOLZ, C. LEHMANN
Phys. Rev., B 6 (1972) 813.
- [43] I.M. TORRENS
(a) Computer Phys. Com., 5 (1973) 32
(b) J. de Physique, 34 (1973) C 1.
- [44] I.M. TORRENS, L.T. CHADDERTON
Phys. Rev., 159 (1967) 671.
- [45] I.M. TORRENS, M.T. ROBINSON
(a) Radiation Induced Voids in Metals - Edité par J.W. CORBETT et L.C. IANNIELLO - USAEC (Albany - 1972) p. 739
(b) Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects - Edité par P.C. GEHLEN, J.R. BEELER Jr, R.I. JAFFEE - Plenum (New-York - 1972) p. 423.
- [46] D. VAN VLIET
Rad. Eff., 10 (1971) 137.
- [47] G.H. VINEYARD
(a) Discr. Farad. Soc., 31 (1961) 7
(b) Proc. Int. School of Physics Enrico Fermi - Academic Press (New-York - 1962) 291
(c) Proc. Int. Conf. on Crystal Lattice Defects - Conf. J. Phys. Soc. Japan, 18, Suppl., 3 (1963) 144.
- [48] M. YOSHIDA
J. Phys. Soc. Japan, 16 (1961) 44.
- [49] J.M. LANORE
Rad. Eff., 22 (1974) 153.
- [50] I.M. TORRENS
Interatomic Potentials - Academic Press (New-York - 1972)
- [51] E. FERMI, E. TELLER
Phys. Rev., 72 (1947) 399.
- [52] N. BOHR
Dan. Vid. Selsk. Matt. Fys. Medd., 18 (1948) n° 8.

- [53] K.O. NIELSEN
Electromagnetically Enriched Isotopes and Mass Spectrometry - Academic Press
(New-York - 1955) p. 68.
- [54] J. LINDHARD
Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd., 28 (1954) n° 8.
- [55] J. LINDHARD, M. SCHARFF
Phys. Rev., 124 (1961) 128.
- [56] J. LINDHARD, M. SCHARFF, H.E. SCHIOTT
Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd., 33 (1963) n° 3.
- [57] O.B. FIRSOV
Zh. Eksp. Teor. Fiz., 36 (1959) 1517
(Trad. Anglaise : Sov. Phys. JETP, 36 (1959) 1076).
- [58] L.M. KISINEVSKI
Izv. Akad. Nauk. SSSR - Ser. Fiz., 26 (1962) 1410
(Trad. Anglaise : Bul. Acad. Sci. USSR - Phys. Ser., 26 (1962) 1433).
- [59] E.S. PARILIS, L.M. KISINEVSKI
Fyz. Tverd. Tela., 2 (1960) 1219
(Trad. Anglaise : Sov. Phys. Sol. State, 3 (1960) 885).
- [60] I. CHESHIRE, J.M. POATE
Proc. Conf. on Atomic Collision Phenomena, Sussex - Edité par D.W. PALMER,
M.W. THOMPSON, P.D. TOWNSEND - North-Holland (Amsterdam - 1970) p. 351.
- [61] I. CHESHIRE, G. DEARNALEY, J.M. POATE
(a) Phys. Lett., 27 A (1968) 304
(b) Proc. Royal. Soc., A 311 (1969) 47.
- [62] C.P. BHALLA, J.N. BRADFORD
Phys. Lett., 27 A (1968) 318.
- [63] K.B. WINTERBON
Can. J. Phys., 46 (1968) 2429.
- [64] A.H. EL HOSHY, J.F. GIBBONS
Phys. Rev., 173 (1968) 454.
- [65] K.B. WINTERBON
Rad. Eff., 15 (1972) 73.
- [66] K.B. WINTERBON, J.B. SANDERS, P. SIGMUND
Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd., 37 (1970) n° 14.
- [67] G. LEIBFRIED
(a) Radiation Damage in Solids - Proc. Intern. School of Phys. Enrico
Fermi - Academic Press (New-York - 1962) p. 227
(b) J. Appl. Phys., 33 (1962) 1933

- [67] (c) Zeits. f. Physik, 171 (1963) 1.
- [68] A. KORCHOVEI, G. GIKA, D. GREKU
Fiz. Tverd. Tel., 4 (1962) 2777
(Trad. Anglaise : Sov. Phys. Sol. State, 4 (1963) 2037).
- [69] D.K. HOLMES
Radiation Damage in Solids, Vol. 1 - IAEA (Vienna - 1962) p. 3
- [70] E.L. HAINES, A.B. WHITEHEAD
Rev. Sci. Instr., 37 (1966) 190.
- [71] K.S. KINCHIN, R.S. PEASE
(a) Rep. Prog. Phys., 18 (1955) 1
(b) J. Nucl. Energy, 1 (1955) 200.
- [72] W.S. SNYDER, J.S. NEUFELD
(a) Phys. Rev., 97 (1955) 1636
(b) Phys. Rev., 99 (1955) 1326.
- [73] E. BROWN, G.H. GOEDECKE
J. Appl. Phys., 31 (1960) 932.
- [74] C. LEHMANN
Nukleonik, 3 (1961) 1.
- [75] M.T. ROBINSON
(a) Phil. Mag., 12 (1965) 741
(b) Phil. Mag., 17 (1968) 639
(c) Radiation Induced Voids in Metals - Publié par J.W. CORBETT,
L.C. IANNIELLO - USAEC (Albany - 1972) p. 397.
- [76] J.B. SANDERS
Can. J. Phys., 46 (1968) 455.
- [77] G. LEIBFRIED
Radiation Damage in Solids - Proc. Intern. School of Phys. Enrico Fermi -
Academic Press (New-York - 1962) p. 227.
- [78] J.A. BRINKMAN
(a) J. Appl. Phys., 25 (1954) 961
(b) Amer. J. Phys., 24 (1956) 246
(c) Radiation Damage in Solids - Proc. Intern. School of Phys.
Enrico Fermi - Academic Press (New-York - 1962) p. 830.
- [79] F. SEITZ, J.S. KOEHLER
Progress in Solid State Physics, Vol. 2 - Academic Press
(New-York - 1957) p. 30.
- [80] A. SEEGER
Second Geneva Conference on Peaceful Uses of Atomic Energy - PUAE, 6 (1958)
250.

- [81] J. STARK
Phys. Zeits., 13 (1912) 973.
- [82] M.M. BREDOV, N.M. OKUNEVA
Doklady Akad. Nauk. SSSR, 113 (1957) 795.
- [83] J.A. DAVIES, G.C. BALL, F. BROWN, B. DOMEIJ
Can. J. Phys., 42 (1964) 1624.
- [84] J.A. DAVIES, F. BROWN, M. Mc CARGO
Can. J. Phys., 41 (1963) 829.
- [85] J.A. DAVIES, B. DOMEIJ, J. UHLER
Arkiv. Physik, 24 (1963) 377.
- [86] B. DOMEIJ, I. BERGSTROM, J.A. DAVIES, J. UHLER
Arkiv. Fysik, 24 (1963) 399.
- [87] P.K. ROL, J.M. FUULT, F.P. WIEHBOCK, M. DE JONG
Proc. 4th Conf. on Ionization Phenomena in Gases - Upsala (1959) p. 257.
- [88] O. ALMEN, G. BRUCE
(a) Nucl. Instr. and Meth., 11 (1961) 257
(b) Nucl. Instr. and Meth., 11 (1961) 279.
- [89] A.L. SOUTHERN, W.R. WILLIS, M.T. ROBINSON
J. Appl. Phys., 34 (1963) 153.
- [90] R.S. NELSON, M.W. THOMPSON
Phil. Mag., 8 (1963) 1677.
- [91] H.O. LUTZ, R. SISZMANN
Phys. Letters, 5 (1963) 113.
- [92] C. LEHMANN, G. LEIBFRIED
J. Appl. Phys., 34 (1963) 2821.
- [93] R.H. SILSBEE
J. Appl. Phys., 28 (1957) 1246.
- [94] G. LEIBFRIED, C. LEHMANN
Z. Physik, 162 (1961) 2.
- [95] P.H. DEDERICHS, G. LEIBFRIED
Z. Physik, 170 (1962) 320.
- [96] R.S. NELSON
Phil. Mag., 8 (1963) 693.
- [97] R.S. NELSON, M.W. THOMPSON
Proc. Roy. Soc. (London) A 259 (1961) 458.

- [98] R.S. NELSON, M.W. THOMPSON, H. MONTGOMERY
Phil. Mag. 7 (1962) 1425.
- [99] J.P. BENZECRI
L'analyse des données - Tome II - Analyse des correspondances -
Dunod (Paris - 1973) p. 15.
- [100] C.R. RAO
Advanced statistical methods in biometric research - John Wiley
(London - 1952) p. 364.
- [101] R.A. JOHNSON
Phys. Rev., 134 (1964) A 1329.
- [102] L. COOPER, D. STEINBERG
Introduction to Methods of Optimisation - W.B. Saunders Co.
(Philadelphia - 1970).
- [103] G.S.G. BEVERIDGE, R.S. SCHECHTER
Optimization : Theory and Practice - Mac Graw Hill (New-York - 1970).
- [104] R.E. DAHL JR, J.R. BEELER JR, R.D. BOURQUIN
Comp. Phys. Com., 2 (1971) 301.
- [105] N.F. MOTT, M.J. LITTLETON
Trans. Faraday Soc., 34 (1938) 485.
- [106] J. TEWORDT
Phys. Rev., 109 (1958) 61.
- [107] R.M.J. COTTERILL, M. DOYAMA
Lattice Defects in Quenched Metals - Academic Press (London - 1965).
- [108] A. RAHMAN
Phys. Rev., 136 (1964) A 405.
- [109] A. RAHMAN, F.H. STILLINGER
J. Chem. Phys., 55 (1971) 3336.
- [110] A. NORDSIECK
Math. of Comp., 16 (1962) 22.
- [111] M. BLACKMAN
Handbuch der Physik, Vol. III, Part. 1 - Edité par S. FLUGGE -
Springer Verlag (Berlin - 1955) p. 325.
- [112] G. BUSCH, H. SCHADE
Vorlesung über Festkörperphysik - Birkhäuser Verlag (Basel - 1973) p. 87.
- [113] F. SEITZ
Discr. Faraday Soc., 5 (1949) 271.

- [114] DANG DINH CUNG
Calcul des énergies de liaison dans les amas de défauts -
Rapport CEA - R - 4500 (1973).
- [115] L. LANDAU, E. LIFCHITZ
Physique Théorique - Tome I - Mécanique - Edition MIR (Moscou 1966).
- [116] G. MOLIERE
Z. Naturforsch., 2a (1947) 133.
- [117] O.B. FIRSOV
Zh. Eksperim. Teor. Fiz., 33 (1957) 696.
(Trad. Anglaise : Sov. Phys. JETP, 6 (1958) 534).
- [118] L.M. HOWE, D.A. CHANNING
Can. J. Phys., 45 (1967) 2467.
- [119] M. BORN, L. MAYER
Z. Physik, 172 (1963) 465.
- [120] A.A. ABRAHAMSON
Cité dans [12] p. 16.
- [121] M.W. THOMPSON
Phil. Mag., 18 (1968) 377.

Manuscrit reçu le 9 juillet 1975

